

Energiebarrieren der Versetzungsbewegung in Kupfer

- Atomistische Simulation -

Von der Gemeinsamen Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina
zu Braunschweig



zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
(Dr.rer.nat.)
genehmigte

D i s s e r t a t i o n

von
Andreas Gitt-Gehrke
aus Hohenlimburg

1.Referent:

Prof. Dr. h: Neuhäuser

2.Referent:

Priv. Doz. Dr. habil. P. Hähner

eingereicht am:

17. Dezember 2001

mündliche Prüfung (Disputation) am :

21. März 2002

Vorveröffentlichungen der Dissertation

Teilergebnisse aus dieser Arbeit wurden mit Genehmigung der Gemeinsamen Naturwissenschaftlichen Fakultät, vertreten durch den Mentor, in folgenden Beiträgen vorab veröffentlicht:

Tagungsbeiträge

- Gitt, A., Rönnpagel, D., Atomic simulation of interaction between dislocations and impurities (Vortrag), Simulation of Microstructure and Strength of Materials, MPI Stuttgart (1998)
- Gitt, A., Rönnpagel, D., MD simulation of dislocations in copper and their interaction with point defects (Poster), CMD17 - JMC 6, Grenoble (1998)
- Gitt, A., Rönnpagel, D., Atomistische Simulation von Versetzungsbewegung in einer verdünnten Legierung (Vortrag), Frühjahrstagung der DPG, Münster (1999)

Danksagung

Diese Arbeit wurde am Institut für Metallphysik und Nukleare Festkörperphysik der TU Braunschweig durchgeführt. Mein Dank gilt meinem Mentor Professor Neuhäuser und seiner Arbeitsgruppe sowie dem gesamten Institut für die Betreuung und Bereitstellung einer fruchtbaren Arbeitsumgebung. Herrn Privat Dozent Dr. Hähner danke ich für sein Referat dieser Arbeit.

Die Unterstützung und kritische Begleitung durch Herrn Dr. Rönnpagel hat immer wieder wertvolle Anregungen für diese Arbeit gegeben.

PhD. Greame Ackland von der Universität Edinburgh danke ich für den dortigen Forschungsaufenthalt im Herbst 1999 und der Europäischen Kommission für die finanzielle Unterstützung durch 'TMR grant number ERB FMGE CT950051'.

Ein großer Dank geht insbesondere an Stefanie, Nils und Mats.

Es war für mich eine große Freude diese Arbeit anzufertigen.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung - Introduction	1
2	Atomistische Betrachtung	5
2.1	Motivation	5
2.1.1	Frenkel-Kontorova Modell der Versetzung	7
2.1.2	Peierls-Nabarro Modell der Versetzung	9
2.2	Atomistisches Modell	11
2.2.1	Atomares Potential	12
2.2.2	Versetzungen in der Atomistik	14
2.3	Simulationsmethoden	17
2.3.1	Molekularstatik und Molekulardynamik	17
2.3.2	Randbedingungen der Simulationszelle	19
2.3.3	Bestimmung einer Sattelpunktslage	24
3	Stabile Versetzungskonfigurationen	28
3.1	Gerade Stufenversetzung	30
3.2	Gerade Schraubenversetzung	35
3.3	Gemischte Versetzung	39
3.4	Diskussion der Ergebnisse	39
4	Versetzungsbewegung in reinem Kupfer	42
4.1	Energie einer Versetzung	42
4.2	Energiebarrieren	49
4.2.1	Stufenversetzung	50
4.2.2	Schraubenversetzung	59
4.2.3	Diskussion der Ergebnisse	66

5	Versetzungsbewegung mit Fremdatomen	70
5.1	Energiebarrieren für verschiedene Atomsorten	71
5.1.1	Nahe Wechselwirkung	71
5.1.2	Fremdatom im Versetzungskern	76
5.2	Bewegung im Hindernisfeld	76
6	Zusammenfassung	80
6.1	Simulationsmethoden	80
6.2	Simulationsergebnisse	81
A	Anhang	84
A.1	Elastische Lösung	84
	Literaturverzeichnis - Bibliography	87

CDROM _____

CD English Summary

T Table of animations

Source code and animations

Kapitel 1

Einleitung

Seit in den dreißiger Jahren des vergangenen Jahrhunderts die Bewegung von linienhaften Kristallbaufehlern, den sogenannten Versetzungen, als grundlegender Mechanismus der Kristallplastizität erkannt wurden, ist die Theorie der Versetzungen ein Gebiet aktiver Forschung geblieben. Für eine Übersicht der ersten fünfzig Jahre Versetzungstheorie verweise ich auf das Buch von Hirth und Lothe [1]. Die Theorie der Versetzungen erstreckt sich vom kollektiven Verhalten vieler Versetzungen mit unzähligen Experimenten und den makroskopischen Modellen der Plastizität über die mesoskopischen bildgebenden Verfahren, insbesondere aus dem Bereich der Elektronenmikroskopie, und den Kontinuumsmodellen der Versetzung hin zu mikroskopischen Betrachtungen einzelner Versetzungen auf atomarer Ebene. Insbesondere sind es die atomaren Koordinations- und Diffusionsmechanismen, welche im Detail über die Versetzungsbewegung entscheiden.

Introduction

In the 1930s the movement of line defects, called dislocations, through crystal structures were recognized as the predominant cause for their macroscopic plasticity. The field of dislocation theory has been subject to intensive research ever since. With their book [1] Hirth and Lothe provide an excellent summary of the first fifty years of research. The dislocation theory of crystal plasticity covers a wide range of phenomena, from macro scale plastic behaviour of solids including a large number of experiments, meso scale continuum models and electron beam imaging techniques down to the micro scale models of single dislocations. At this very basic atomic level dislocation movement is controlled by recoordination and diffusion. The recent increase in computer resources and the parallel development of more realistic interatomic potentials [2][3][4] have led to the use of molecular dynamics in solid-state modelling. In 1966 [5] the first simulation of a dislocation core

Die stetig steigende Leistung moderner Computer und die Entwicklung realistischer interatomarer Potentiale [2][3][4], haben es ermöglicht, die Methode der molekulardynamischen Simulation auch auf physikalische Fragestellungen des Festkörpers erfolgreich anzuwenden. Anders als bei den ersten Relaxationssimulationen von 1966 [5] mit knapp tausend Atomen sind heute Simulationen mit einigen Millionen Atomen [6] und vielen tausend Iterationsschritten möglich. Durch diese Entwicklung können auch solche Defektstrukturen studiert werden, die eine große Ausdehnung haben, wie Krongrenzen in Polykristallen [7][8], Risse [9][10], Phasenumwandlungen [11], Stapelfehler [12] und Versetzungen, z.B. [13][14][15]. Gemessen an den Größenordnungen der Teilchenzahlen im Festkörper stellen die heutigen Simulationsbereiche immer noch einen sehr kleinen Ausschnitt dar. Um die Simulationen qualitativ sowie quantitativ an die reale Physik des Festkörpers anzunähern, ist es unverzichtbar, die Interaktion der berechneten Strukturen mit dem Rest des Festkörpers zu modellieren. Zusätzlich sind Methoden zu entwickeln, um die Zustände jenseits des mechanischen Gleichgewichtes, insbesondere die Phasenraumpfade über eine zu bestimmende Sattelpunktslage, gezielt zu erzeugen.

consisted of less than thousand atoms. Nowadays simulations of millions of atoms [6] at reasonable time-scales can be carried out on subjects like grain boundaries in polycrystals [7][8], crack propagation [9][10], phase transformation [11], stacking faults [12], and dislocations, e.g. [13][14][15]. Even though these simulations contain large numbers of atoms these numbers are very small compared to the typical dimensions in a solid. In order to achieve results that come close to the real properties of the system under study special care has to be taken in the design of the atomistic to continuum interface. On the other hand methods have to be developed to study the transition states beyond mechanical equilibrium.

Reading guidelines The present work is intended to present some of the methods that can be used to study solid-state defects like dislocations with the help of atomistic simulations. It is separated in two parts. The first part is written in German and provides a theoretically motivated summary of the methods being used (chapter 2), the presentation and discussion of the results from various simulations (chapters 3, 4, 5) and a summary (chapter 6). The second part in English resides on the CDROM. It includes a summary of

Diese Arbeit stellt die methodischen Ansätze vor und prüft deren Gültigkeit an der konkreten Fragestellung der mikroskopischen Energiebarrieren für die Versetzungsbewegung in einem Kupfereinkristall. Damit schließen die vorliegenden Simulationen die bestehende Lücke zwischen den quantenmechanischen Ab-Initio Rechnungen und den mesoskopischen Kontinuumsmodellen und stellen für letztere wichtige Eingabeparameter bereit. Daneben ist es möglich qualitativ die ablaufenden Prozesse nachzuvollziehen und zu visualisieren.

Aufbau Entsprechend der methodologischen Zielsetzung ist die Arbeit zweigeteilt. Der erste, deutschsprachige Teil in Buchform enthält grundlegende theoretische Überlegungen (Kapitel 2), die Vorstellung und physikalische Interpretation der Simulationsergebnisse (Kapitel 3, 4, 5) und eine Zusammenfassung (Kapitel 6). Ein zweiter, englischsprachiger Teil gibt eine Zusammenfassung der Ergebnisse, präsentiert die zugehörigen Visualisierungen und bietet eine einführende Beschreibung der Methoden anhand des Quelltextes der Simulation. Dieser zweite Teil liegt als CDROM bei.

the results discussed in the first part with additional animated sequences and a description of the methods on the basis of the source code.

Deutscher Teil

Buchform

Kapitel 2

Atomistische Betrachtung des Festkörpers

2.1 Motivation

Die gerade Versetzung als linearer Defekt des Kristallgitters ist von Natur her ein atomistisches, d.h. auf Ebene der Gittervektoren ein diskretes Phänomen. Die wenigen charakterisierenden Größen, der Linienvektor der Versetzung, der Gleitebenennormalenvektor und der Burgersvektor sind Gittervektoren[16]. Aus einer Skizze 2.1 einer Stufenversetzung im einfachen kubischen Kristallgitter sieht man deutlich, daß es zwei Bereiche gibt, in denen die Beschreibung der Versetzung und deren Dynamik als Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ qualitativ unterschiedlich ist:

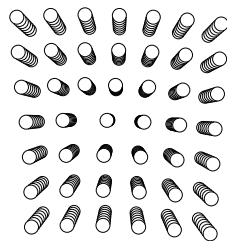


Abbildung 2.1: Stufenversetzung im einfach kubischen Gitter

1. Im inneren Feldbereich, dem sogenannten Kern der Versetzung, ist die Koordination der Atome zu ihren Nachbarn gegenüber der des ungestörten Kristallgitters verändert.
2. Im äußeren Feldbereich bleibt die Koordination eines Atoms zu seinen Nachbarn des ungestörten Gitters erhalten, es ändern sich nur die relativen Abstände.

Für den Bereich 1 bedeutet die veränderte Koordination, daß bei einer Bewegung der Versetzung kleine Wegstrecken der Versetzung große Änderungen der

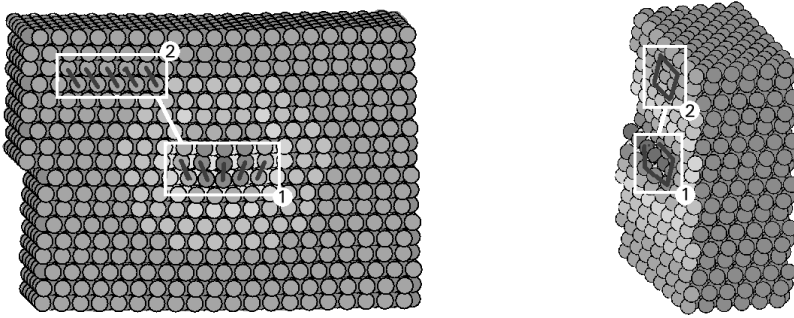


Abbildung 2.2: Anordnung der Atome für Stufen- und Schraubenversetzung im fcc-Gitter.

relativen Atomabstände zur Folge haben, während diese Änderungen im Bereich 2 sehr viel geringer ausfallen.

Der Bereich 2 außerhalb des Versetzungskerns läßt sich demnach gut durch eine Kontinuums- theorie der Verschiebungen annähern. Dies gilt insbesondere in großen Abständen zum Versetzungskern, wo bei hinreichend homogenen Teilvolumina die Bedingungen des thermodynamischen Grenzwertes großer Teilchenzahlen Anwendung finden und z.B. auf die lineare[17][18], nichtlineare [19][20][21] oder nichtlokale[22] Elastizitätstheorie führen. In kleineren Abständen zum Kern innerhalb des Bereichs 2 werden oft die vorher genannten Ansätze extrapoliert. Ein speziell abgestimmter Ansatz beruht auf der Verwendung der dynamischen Greenschen Funktionen aus der Gittertheorie des Kristalls [23][24]. Allen diesen Ansätzen ist jedoch gemeinsam, daß sie trotz der guten Beschreibung von Wechselwirkungen und der groben geometrische Lage von Versetzungen indifferent sind gegenüber den Prozessen im Bereich 1. Nur dort erschließen sich mit einem entsprechenden atomaren Ansatz die Gründe dafür, daß es nur wenige stabile Lagen insbesondere für aufgespaltene Versetzungen gibt, welche sich periodisch mit dem Gitter wiederholen. In diesen periodischen Energieunterschieden für die Lage der Versetzung sind die zwei wichtigen Effekte begründet, welche für die Dynamik der Versetzung und damit letztlich auch für das Verformungsverhalten mesoskopischer Bereiche maßgeblich sind:

- die Existenz einer kritischen Spannung, welche mindestens zum Ablösen der Versetzung aus der Ruhelage benötigt wird, und
- die Existenz innerer Reibung, d.h. die Dissipation von Energie aus dem Versetzungskern mittels Gitterschwingungen und elektronischer Wärmeleitung.

Im folgenden werden zwei einfache Modelle vorgestellt, die eine erste Annäherung an den atomistischen Bereich bieten und zugleich eine analytische oder einfache numerische Lösung erlauben.

2.1.1 Frenkel-Kontorova Modell der Versetzung

Das einfachste Modell einer Stufenversetzung auf atomarer Skala ist das Frenkel-Kontorova Modell [25] [26]. In der ursprünglichen Form handelt es sich um ein eindimensionales periodisches Potential $U^{\text{FK}}(u^{(i)}) = \frac{k_2\gamma}{2\pi}(1 - \cos(2\pi\frac{u^{(i)}}{b}))$ des Halbraumes unter- bzw. oberhalb der Gleitebene mit darin liegender linearer Kette von Atomen der anderen Halbebene. Dabei bezeichnet $u^{(i)}$ die Verschiebung des Atoms i , b die Periodizität des Potentials und $\frac{k_2\gamma}{2\pi}$ eine Energiekonstante, die z.B. aus der Scherspannung für kleine Dehnungen abgeschätzt wird. Um die Stufe zu repräsentieren, können in einer der Potentialmulden zwei oder auch kein Atom gegenüber dem regulären einen Atom eingebracht werden.

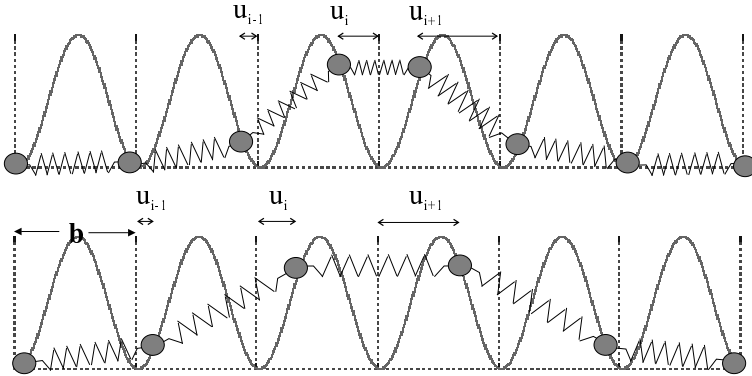


Abbildung 2.3: Zwei Darstellungen einer Stufenversetzung im Frenkel-Kontorova Modell.

Charakterisiert wird das Modell durch die Bewegungsgleichung

$$m \frac{d^2 u^{(i)}}{dt^2} = k_1(u^{(i+1)} - 2u^{(i)} + u^{(i-1)}) + \frac{k_2\gamma}{b} \sin(2\pi \frac{u^{(i)}}{b}) \quad , \quad (2.1)$$

ergänzt jeweils durch Terme für Reibung, stochastische Kräfte, Kräfte externer Spannungen u.ä.

In dieser Form ist das Modell insbesondere zur Veranschaulichung und zur numerischen Simulation der Dynamik tauglich, welche zur kritischen Spannung des

Modells [27][28], zur Emission akustischer Signale durch Versetzungsbewegung [29] und zur Versetzungsbewegung bei endlicher Temperatur und mit Hindernissen [30][31] durchgeführt wurden.

Das Model ist auch ohne weiteres auf die gesamte Gleitebene erweiterbar. Ein mögliches einfaches Potential in zwei Dimensionen für die $\{111\}$ -Ebene eines kubisch flächenzentrierten Kristallgitters mit Gitterkonstante a_0 ist:

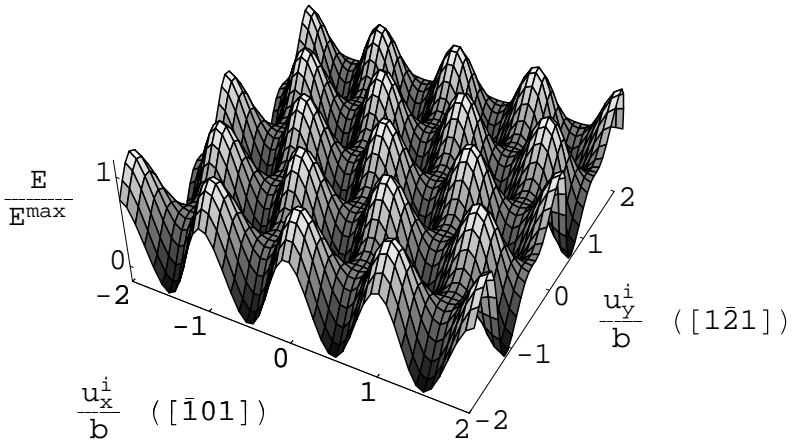


Abbildung 2.4: 2-dimensionales Frenkel-Kontorova Potential

$$\begin{aligned}
 U_{\{111\}}^{\mathbf{FK}}(u_x^{(i)}, u_y^{(i)}) &= \frac{k_2 \gamma}{2\pi} \left(\sin\left(\frac{\pi}{3b}(-2 + 3u_x^{(i)} + \sqrt{3}u_y^{(i)})\right) \right. \\
 &\quad \cdot \sin\left(\frac{\pi}{3b}(1 - 3u_x^{(i)} + \sqrt{3}u_y^{(i)})\right) \\
 &\quad \cdot \sin\left(\frac{\pi}{3b}(-1 + 2\sqrt{3}u_y^{(i)})\right) + 0.5 \Big) \\
 &\text{mit } b = \frac{a_0}{\sqrt{2}}
 \end{aligned}$$

Mit dieser 2-dimensionalen Darstellung kann man die beiden Versetzungstypen Stufenversetzung, d.h. Burgersvektor senkrecht zum Linienvektor, und Schraubenversetzung, d.h. Burgersvektor parallel zum Linienvektor, unterscheidbar darstellen. Gemischte Versetzungstypen, aufgespaltene Versetzungen und Versetzungsloops sind ebenfalls darstellbar. Hier und in Kombination mit anderen Modellen wie dem Linienspannungsmodell [32], ist dieses Modell durch seine Einfachheit ausgezeichnet.

Eine analytische Approximation beruht auf dem sogenannten Kontinuumsübergang $(u^{(i+1)} - u^{(i)} + u^{(i-1)}) \rightarrow \frac{d^2 u}{dx^2}$, so daß sich die sogenannte Sine-Gordon Gleichung in phonetischer Anlehnung im Englischen an die Klein-Gordon Gleichungen der Quantenmechanik, auch als Ennepper-Gleichung bekannt, ergibt. Eine Lösungskasse ist die solitärer Wellenpulse der Form [33][34]

$$u(x, t) = \frac{2b}{\pi} \arctan(\exp(\pm(2\pi k_2 k_1^{-1} \gamma)^{\frac{1}{2}} (1 - v^2)^{-\frac{1}{2}} (x - vt))) \quad .$$

Diese Lösungen können zum Verständnis von Dynamik der Versetzung als Quasiteilchen des Verschiebungsfeldes [35][36][37], dessen Wechselwirkung mit Punktdefekten [38][41][42][43] und als zweidimensionales Soliton [39][40] beitragen, zeigen jedoch wieder die Defizite kontinuierlicher Lösungen, d.h. das Fehlen von innerer Reibung und ausgezeichneter Ruhelagen. Das Solitonenmodell ist auf Anordnungen mehrerer Versetzungen nicht einfach übertragbar, da die Solitonen nicht miteinander wechselwirken. Eine aufwendige Vielversetzungslösung wäre hierzu notwendig.

Daß das Frenkel-Kontorova Modell auch in seinen qualitativen Ergebnissen anfechtbar bleibt [50], liegt insbesondere an der Art des Potentials. Während die Kräfte im Sinne der linearen Kette der Gittertheorie des Kristalls eine erste Näherung der zu erwartenden Elastizitätstheorie darstellen, ist das Potential, welches die atomistische Seite des Modells verkörpert, in der Wahl als sinusförmig willkürlich und durch seine Starrheit unrealistisch. Das Frenkel-Kontorova Modell zeigt nicht, daß sich die beiden dargestellten Konfigurationen in Abb. 2.3 bei Vertauschung von Potentialminima und Massenpunkten im ausgedehnten Material als identisch erweisen müssen. Damit zeigt sich deutlich, daß das Frenkel-Kontorova Modell in seiner quantitativen Anwendung auf Substrate mit epitaktisch dünnen Schichten[50] beschränkt bleiben muß. Qualitativ wird jedoch klar die Notwendigkeit aufgezeigt den Versetzungskern und die ihm zugeordneten physikalischen Prozesse (s. 2.1) mit atomistischen Modellen zu erfassen.

2.1.2 Peierls-Nabarro Modell der Versetzung

Eine Weiterentwicklung des Frenkel-Kontorova Modells ist das Peierls-Nabarro Modell [44][45]. Das Potential des Frenkel-Kontorova Modells bleibt erhalten, wird jedoch genutzt um eine Spannung herzuleiten, welche zwei linear elastische, isotrope Halbräume verbindet. Im einfachsten Fall eines einfach kubischen Kristallgitters ergeben sich aus der Gleichgewichtsbedingung der Spannungen von Halbraum und Potential die Integralgleichungen [1]

Stufenversetzung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\left. \frac{du_x}{dx} \right|_{x=x'} dx'}{x - x'} = \frac{b(1 - \nu)}{2d} \sin\left(\frac{4\pi u_x}{b}\right)$$

Schraubenversetzung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\left. \frac{du_z}{dx} \right|_{x=x'} dx'}{x - x'} = \frac{b}{2d} \sin\left(\frac{4\pi u_z}{b}\right)$$

mit den analytischen Lösungen für die Verschiebungen in der Gleitebene:

Stufenversetzung:

$$u_x = -\frac{b}{2\pi} \arctan\left(\frac{2(1 - \nu)x}{d}\right)$$

Schraubenversetzung:

$$u_z = -\frac{b}{2\pi} \arctan\left(\frac{2x}{d}\right) .$$

Dabei ist d die Dicke der Gleitebene und ν die Querkontraktionszahl. Die Möglichkeit der analytischen Lösung ist für andere Konfigurationen wie aufgespaltene und gekrümmte Versetzungen nicht mehr gegeben. Der Ansatz ist so gewählt, daß er den Einfluß des umgebenden elastischen Kontinuums berücksichtigt. Die Polstelle der elastischen Versetzungslösung entlang der Versetzungslinie wird jedoch beseitigt. Kritikpunkte bleiben die willkürliche Wahl des Potentials sowie die Tatsache, daß die lineare Elastizitätstheorie bis in eine Nähe des Versetzungskerns extrapoliert wird, in der sie nicht mehr gilt. Aus den einfachen Rechnungen lassen sich dennoch Abschätzungen für die kritische Spannung für das Einsetzen der Versetzungsbewegung [46][47][48], die sogenannte Peierlsspannung σ_P , und die zugehörige Energiebarriere gewinnen. Aufgrund der Konstruktion ist das Peierls-Nabarro Modell ebenfalls für Halbräume verschiedener Materialien mit Fehlpassung [49], d.h. bei sogenannten van der Merwe Versetzungen, anwendbar.

Seit der Formulierung des Modells durch Peierls und Nabarro in den vierziger Jahren des vergangenen Jahrhunderts wurden viele Korrekturen und Erweiterungen vorgeschlagen. Einen guten Überblick darüber gibt [50]. Von besonderer Relevanz für diese Arbeit sind die Betrachtungen von Schoeck zur Einbeziehung von Aufspaltung, elastischer Anisotropie und Einfluß der elektronischen Bindung in das Peierls-Nabarro Modell [58]. Da insbesondere die Rechnung zur Aufspaltung in dieser Arbeit benötigt wird, soll sie kurz dargestellt werden. Aufbauend auf [51] hat Schoeck in den letzten Jahren mit [52][53][54][55][56][57] unter anderem die Aufspaltung einer Versetzung in einem zweidimensionalen Peierlspotential

$\Gamma(\mathbf{u}(x))$ ähnlich dem aus Abbildung 2.4 beschrieben. Die Idee liegt darin, ausgehend von der bewährten Lösung des Peierls-Nabarro Problems für eine geeignete Kombination von Burgersvektoren $\mathbf{b} = \sum_i \mathbf{b}^{(n)}$, definiert in der Gleitebene, den folgenden Ansatz mit Versuchsfunktionen zu machen:

$$\mathbf{u}(x) = \sum_i \frac{\mathbf{b}^{(n)}}{\pi} \arctan \frac{x - x_0^{(n)}}{\omega^{(n)}} + \frac{\mathbf{b}}{2}. \quad (2.2)$$

Dabei sind die Lagen $x_0^{(n)}$, die Weiten $\omega^{(n)}$ und die partiellen Burgersvektoren $\mathbf{b}^{(n)}$ die freien Parameter nach denen eine Lösung gemäß dem Ritzschen Variationsprinzip bestimmt wird. Die zugehörigen elastischen und atomistischen Energien $E^{(elast)}$ und $E^{(\Gamma)}$ sind nach [55]

$$\begin{aligned} E = & \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{\partial u_i(x')}{\partial x'} \frac{\sum_{\alpha=1}^6 L_i^{(\alpha)} L_j^{(\alpha)}}{-4\pi\iota(x - x')} u_j(x) \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} dx \Gamma(\mathbf{u}(x)) \end{aligned} \quad (2.3)$$

mit den Bezeichnungen aus A.1. Die analytische Integration des Terms für die elastische Energie gibt ebenfalls [55]. Zur Berechnung einer aufgespaltenen Versetzung müssen demnach mindestens zwei separate Burgersvektoren $\mathbf{b}^{(n)}$ entsprechend den Burgersvektoren der Partialversetzungen gewählt werden.

2.2 Atomistisches Modell

Von den in 2.1 beschrieben atomistischen Modellen unterscheiden sich jene, welche den Festkörper als Gesamtheit von Atomen betrachten. Anwendung auf das Versetzungsproblem finden Ab-Initio Methoden, Molekulardynamische Methoden und in seltenen Fällen die Monte-Carlo Methode [59]. Bei den Ab-Initio Rechnungen werden für einen Ausschnitt des Festkörpers die Lagen der Atome durch näherungsweise Bestimmung der gesamten elektronischen Wellenfunktionen bestimmt. Diese Berechnungen, z.B. mit der Dichtefunktionalformulierung sind sehr aufwendig und daher nur für Anordnungen mit einigen hundert Atomen anwendbar. Diese Art der Simulation wird oft benutzt um grundlegende Eigenschaften des jeweiligen Festkörpers zu bestimmen. Für Versetzungen gibt es Rechnungen zu Halbleitern [61][60][63][64], Diamantkristallen [62] und Metallen [66][67][68]. Ein möglicher Vergrößerungsschritt für das betrachtete Volumen besteht im Übergang zur Molekulardynamik (siehe 2.3.1). Den Atomen werden untereinander sogenannte Pseudopotentiale zugeordnet, welche die elektronischen und elektrostatischen Wechselwirkungen annähern. Die Bewegungen

der Atome ergeben sich aus der Lösung der Newtonschen Bewegungsgleichung (siehe z.B. [71][70][69][72]).

2.2.1 Atomares Potential

Bei den in der Molekuldynamik und Molekularstatik eingesetzten Potentialen finden sich neben vielen Kombinations- und Speziallösungen die folgenden drei Klassen:

1. Reine Paarpotentiale: Diese historisch erste Klasse von Potentialen mit dem Coulomb-Potential als direkten Vertreter für Ionenkristalle und den bekannten Lennard-Jones-, Morse- und Born-Meyer-Potentialen für Ionenkristalle und Festkörper in isotroper Näherung wurden bei den ersten Simulationen verwandt [73][74]. Bei diesen werden jeweils zwei Paarsterme mit unterschiedlichen Vorzeichen und gegebenenfalls zusätzliche Volumenkkräfte eingesetzt, um eine stabile Kristallstruktur mit den grundsätzlichen Eigenschaften wie Gitterkonstante und elastische Konstanten zu erhalten. Die erste Simulation einer Versetzung von Cotterill und Doyama [5] basiert auf einem Morse-Potential für Kupfer. Neben diesen Potentialen, die nur in der praktischen numerischen Anwendung einen willkürlichen Abschneideradius kennen, gibt es die Potentiale nach Johnson und Englert [73], welche als Anpassung mit kubischer Polynomfunktionen auf kurzreichweitigen Intervallen für ausgewählte physikalische Parameter erstellt werden. Eine solche Versetzungssimulation findet sich in [75]. Neuere Ansätze kombinieren die verschiedenen Paarpotentialtypen je nach den Anforderungen der Simulation [76].
2. Vielteilchenpotentiale: Diese Klasse basiert auf der Kombination von reinen Paarpotentialen zur Darstellung der ionischen Wechselwirkungen und von Vielatomtermen für die elektronischen Anteile und findet insbesondere bei Metallen Anwendung. Eine genauere Beschreibung gibt der nächste Abschnitt.
3. Gerichtete Vielteilchenpotentiale: Diese Potentiale von Typ Bond-Order-Potential [77] und Tersoff-Potential [78] berücksichtigen die Bilanz der ausgehenden Bindungen und deren Winkel zueinander mit dem Ansatz von Drei-Teilchen-Wechselwirkungen. Anwendungsgebiete sind entsprechend Festkörper und Moleküle mit kovalentem Bindungscharakter.

Zur Klasse der im Aufzählungspunkt 2 angesprochenen Vielteilchenpotentiale gehören insbesondere die **E**ffective-**M**edium-**T**heory [79], **E**mbdedded-**A**tom-**M**ethod [3] und **F**innis-**S**inclair-Potentiale. Diese besonders für Metalle geeignete

ten Potentiale haben alle die gleiche mathematische Gestalt der Gesamtenergie E für N Atome

$$E = \sum_i^N \left(\frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N V_{ij}(r_{ij}) - f \left(\sum_j^N \Phi_{ij}(r_{ij}) \right) \right). \quad (2.4)$$

Dabei sind V und Φ aufgrund der starken elektronischen Abschirmung der elektrostatischen Kräfte in Metallen kurzreichweitige Funktionen des interatomaren Abstandes r_{ij} . In der Herleitung des **FS**-Potentials ergibt sich für die Funktion f die Wurzel als einbettende Funktion in Näherung des 2. Momentes der elektronischen Zustandsdichte im Tight-Binding Ansatz. Für Übergangsmetalle enthält dieses Moment die hopping-Integrale für die d-Orbitale, in Edelmetallen die sp-d-Hybridorbitale [80]. Die Energie pro Atom ist demnach

$$E_i^{\text{FS}} = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N V_{ij}(r_{ij}) - \left(\sum_j^N \Phi_{ij}(r_{ij}) \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.5)$$

wobei V ein Paarpotential ist, das die elektrostatische Abstoßung der Atomkerne abbildet und durch die Friedel-Oszillationen die Kristallstruktur bestimmt, und Φ eine Paarfunktion, welche durch die Einbettungsfunktion neben der Kohäsion die Koordination und damit mögliche Defekte gut beschreibt. Das **FS**-Potential wurde in den Simulationen dieser Arbeit benutzt.

Bei der konkreten Bestimmung des **FS**-Potentials werden V und Φ durch kubische Interpolationspolynome angenähert. Ein Abschneideradius wird eingeführt, so daß das Potential kurzreichweitig ist, jedoch werden die notwendigen Ordnungen von Nachbarschaftsschalen einbezogen, um die jeweils stabile Kristallstruktur energetisch zu favorisieren. Für ein reines Metall A lauten die Ansätze [81]

$$V_{AA}(r_{ij}) = \sum_{k=1}^n a_k^{AA} H(r_k^{AA} - r_{ij}) (r_k^{AA} - r_{ij})^3 \quad (2.6)$$

$$\Phi_{AA}(r_{ij}) = \sum_{k=1}^n A_k^{AA} H(R_k^{AA} - r_{ij}) (R_k^{AA} - r_{ij})^3 \quad (2.7)$$

mit der Stufenfunktion

$$H(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x \geq 0, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Für eine Legierung von Metall A und Metall B werden für die Bindung gleicher Atomsorten die Terme aus 2.6 und 2.7 benutzt und für die Bindung verschiedener

Atomsorten

$$V_{AB}(r_{ij}) = V_{BA}(r_{ij}) = \sum_{k=1}^n a_k^{AB} H(r_k^{AB} - r_{ij}) (r_k^{AB} - r_{ij})^3 \quad (2.8)$$

$$\Phi_{AB}(r_{ij}) = \Phi_{BA}(r_{ij}) = \sqrt{\Phi_{AA}(r_{ij}) \Phi_{BB}(r_{ij})}. \quad (2.9)$$

Diese Form der **FS**-Potentiale wurde für die Metalle Ag, Au, Cu [80], Ti [82] und andere [83][80] und die Legierungen Cu-Ag [84], Cu-Ag [81], Cu-Bi [85], Cu-Fe [86] und Cu-Ti [87] gewählt. Dabei beruhen diese, anders als bei den **EMT**- und **EAM**-Potentialen, welche größtenteils auf Ab-Initio Rechnungen zurückgeführt sind, auf einer Anpassung an physikalische Parameter wie elastische Konstanten, Gitterkonstanten, kohäsive Energien, Grenzenergie für Leerstellenbildung und Mischungsenthalpien für verschiedene Punkte im Phasendiagramm. Andere Parameter, z.B. Druck-Volumen Relationen, wurden quantenmechanischen Rechnungen entnommen. Überprüft wurden die Potentiale auf die Stabilität der zum jeweiligen Punkt des Phasendiagramms gehörenden Gitterstruktur gegenüber anderen, Bildungsenergien für Leerstellen und Zwischengitteratome, Oberflächenenergie und Oberflächenrelaxation. Details hierzu sowie die verwendeten Werte für die Parameter a_k , A_k , r_k und R_k findet man in den erwähnten Veröffentlichungen. Die in dieser Arbeit benutzten Parameter sind darüber hinaus auf der beigelegten CDROM angegeben.

2.2.2 Versetzungen in der Atomistik

Alle vereinfachenden Versetzungsmodelle des Kontinuums gehen von der Existenz einer Linie im Raum aus, welche die Lage der Versetzung definiert. Dies gilt im Linienspannungsmodell [88] ebenso wie in der elastischen Rechnung (Anhang A.1). Eine solche Linie ist das Resultat der Übertragung des Konzeptes zur Charakterisierung der Versetzung durch den Burgers-Umlauf 2.5.i in die Kontinuums-theorie. Der Burgers-Umlauf wird in ein Pfadintegral Abb. 2.5.ii) um ein infinitesimales Gebiet angesehen, das die gesamte Verschiebung aufgrund der Versetzung als Diskontinuität enthält. Diese Betrachtungsweise verliert ihre Gültigkeit schon in den einfachen atomistischen Modellen aus 2.1. Da die Kontinuumsmodelle für die Beschreibung großer Volumina und großer Versetzungszahlen unerlässlich sind, muss eine äquivalente Konstruktion für die atomistischen Modelle verfügbar

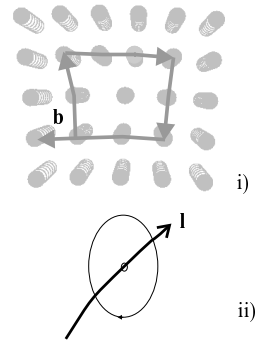


Abbildung 2.5: Burgers-Umlauf um Stufenversetzung

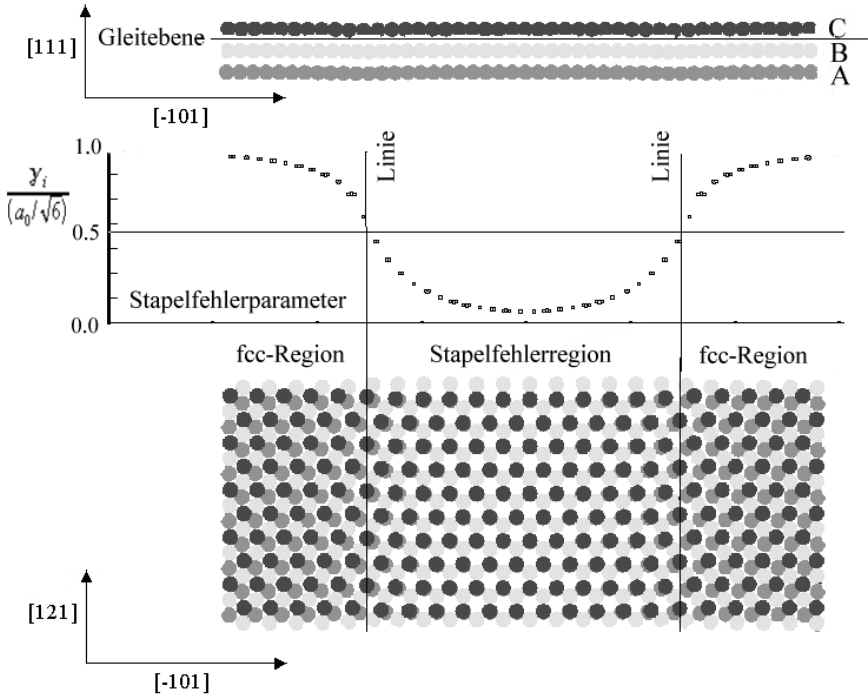


Abbildung 2.6: Modell der Bestimmung der Linien von aufgespaltenen Versetzungen durch den Stapelfehlerparameter $\gamma_i/(\frac{a_0}{\sqrt{6}})$.

sein, welche eine Linie festlegt.

Im folgenden wird die Versetzung im Modell aus N Atomen betrachtet. Das atomistische Modell hat als einzige Charakteristik für eine Versetzung das Verschiebungsfeld, auswertbar an den Positionen der Atome. Die Atompositionen mit dem Verschiebungsfeld der Kontinuumsmodelle zur Deckung zu bringen, um so auf die Linie zu schließen ist kein gangbarer Weg, da die atomistischen Modelle im Versetzungskern keine Diskontinuitäten und somit stark abweichende Verschiebungen aufweisen. Atome in der Nähe der Versetzungslinie kann man auf verschiedene Weise herausfiltern. Bisher benutzte Methoden sind

- die Auftragung der relativen Verschiebungen [89][90][91][92],
- die Festlegung von lokalen Energieschranken [6],

- die Berechnung lokaler Dehnungsfelder [92][76],
- die Berechnung lokaler Spannungsfelder [24] und
- die Bestimmung lokaler Burgers-Umläufe [93].

Diese Verfahren haben alle den Vorteil, Versetzungen beliebiger Orientierung in der Simulationszelle zu finden, jedoch den Nachteil, daß die Lage der Versetzung nur mit der maximalen Genauigkeit von einem Atomabstand nächster Nachbarn bestimmt werden kann. Ist, wie im Fall dieser Arbeit, eine genaue Kenntnis über die Lage der Gleitebene vorhanden, so kann im vorliegenden Fall aufgespaltener Versetzungen die Eigenschaft der Gleitebene zwischen den Partialversetzungen, d.h. der Stapelfehler, zur Festlegung der Linienpositionen herangezogen werden. Die betrachteten Versetzungen in Kupfer haben die Gleitebenennormale $[111]$ und den Linienvektor $[\bar{1}21]$ für eine Stufenversetzung sowie $[\bar{1}01]$ für eine Schraubenversetzung. Die Aufspaltung in Partialversetzungen lautet für Stufenversetzung und Schraubenversetzung

$$\frac{1}{2}[\bar{1}01] \rightarrow \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2] + \frac{1}{6}[\bar{2}11]. \quad (2.10)$$

Vereinfacht läßt sich der Stapelfehler bei einer Stufenversetzung wie in Abbildung 2.6 darstellen. Die normale Stapelfolge ABC von $\{111\}$ -Ebenen des kubisch-flächenzentrierten (fcc) Gitters ändert sich zwischen den Partialversetzungen zu ABA. Eine Projektion der Atompositionen entlang $[111]$ zeigt einen charakteristischen Verlauf des Abstandes der Atome aus den Ebenen A und C/A in der Ebene der Projektion

$$\gamma_i = \min_j \left[(\mathbf{r}^{(i)} - \mathbf{r}^{(j)}) \cdot \mathbf{l} \right]^2 + (\mathbf{r}^{(i)} - \mathbf{r}^{(j)}) \cdot \mathbf{m} \right]^2 \Bigg)^{\frac{1}{2}} \quad (2.11)$$

mit $\mathbf{l} \times \mathbf{m} = [111]$,
Atom $i \in \text{Ebene A}$ und Atom $j \in \text{Ebene C}$.

Die Funktion γ_i hat im reinen fcc-Gitter der Gitterkonstanten a_0 den Wert $\frac{a_0}{\sqrt{6}}$ und in der reinen Stapelfehlerregion den Wert Null. Durch Interpolation wird die Lage der Linien dort angenommen, wo sich der Wert $\frac{1}{2} \frac{a_0}{\sqrt{6}}$ ergibt. Für eine Atomkonfiguration gemäß den Verschiebungen der linearen, anisotropen Elastizitätstheorie wird die Position der Linie mit der Genauigkeit von 0.1\AA ermittelt, relative Verschiebungen der Linien jedoch noch eine Größenordnung genauer. Wie man in den Animationsbeispielen auf der CDROM sehen kann, ist der Algorithmus auch in der Lage, gekrümmte Versetzungslinien zu detektieren.

2.3 Simulationsmethoden

In diesem Abschnitt werden die Grundlagen der benutzten Simulationsmethoden vorgestellt. Eine ausführliche Darstellung inklusive Details der Implementierung und der Quellcode der Simulation befindet sich auf der CDROM.

2.3.1 Molekularstatik und Molekulardynamik

Simuliert man einen Ausschnitt eines Festkörpers durch eine Anzahl N von Atomen, die durch die Potentiale aus Abschnitt 2.2.1 wechselwirken, so hat man die Wahl zwischen statischer und dynamischer Rechnung. Im Fall der Molekularstatik führt man eine Relaxation der Atompositionen mit den vom Potential ausgehenden Kräften und gegebenenfalls zusätzlichen Randbedingungen aus. Der erreichte Zustand, in dem die resultierende Kraft an jedem Atom jeweils Null ist, entspricht dem eines mechanischen Gleichgewichtes, d.h. eines thermodynamischen Gleichgewichtes für die Temperatur 0K. Sollte es sich bei dem relaxierten Zustand nur um ein lokales Minimum der potentiellen Energie handeln, so hat man auch nur eine metastabile lokale Gleichgewichtslage.

Die Molekulardynamik, z.B. [71][70][69][72], fußt in dem Prinzip der Ergodizität. Hierbei wird angenommen, daß das dynamische System bei der fortlaufenden Integration der Newtonschen Bewegungsgleichungen über einen langen Zeitraum mit seinem Weg durch den Phasenraum jedem Punkt desselben beliebig nahe kommt [94][95]. Daher wird die zeitliche Mittelung makroskopischer Größen dem thermodynamischen Ensemblemittelwert gleichgesetzt. Da die Größe der Simulation mit maximal einigen 10^6 Atomen gegenüber den üblichen Atomzahlen in makroskopischen Systemen, welche mindestens in der Größenordnung der Avogadro Zahl $N_{\text{Avogadro}} \approx 6 \cdot 10^{23}$ liegen, sehr klein ist, ergibt sich die Notwendigkeit, durch die Wahl von Randbedingungen den thermodynamischen und mechanischen Anschluß an ein ausgedehntes Kontinuum zu modellieren. Die Art der Randbedingungen legt neben den mechanischen Eigenschaften, siehe Abschnitt 2.3.2, zusammen mit anderen Zwangsbedingungen, die Art der bei der Interpretation der auswertbaren Größen zu verwendenden thermodynamischen Gesamtheit fest:

- Ein abgeschlossenes System wird durch eine mikrokanonische Gesamtheit charakterisiert. Als zugehörige Randbedingungen kommen in Frage:
 1. freie Ränder, d.h. es wird die interne und die Gesamtdynamik eines Atomclusters oder eines Moleküls bzw. Makromoleküls auf der Nanoskala beschrieben,
 2. ein Abschluß durch die periodische Fortsetzung der Simulationszelle entlang drei linear unabhängigen Symmetrieachsen, und

3. die Einfassung durch einen starren Rahmen aus festgehaltenen Atomen.
- Für eine Simulation unter konstanter Temperatur bei gleichzeitiger mechanischer Arbeit muß die Simulationszelle an ein Wärmebad gekoppelt werden. Dies entspricht dem kanonischen Ensemble. Dies kann durch die zusätzliche Einführung eines Freiheitsgrades geschehen, der den Wärmeaustausch mit dem Wärmebad bilanziert [96][97]. Ein anderer Ansatz ist die Einführung von stochastischen Kräften und entsprechenden Dämpfungstermen proportional zur Geschwindigkeit [98][99] [100]. Wird zusätzlich der Druck bzw. Spannungszustand kontrolliert, so kommen zusätzliche Freiheitsgrade für das Volumen bzw. der Metriktenor der Simulationszelle hinzu [101][98]. Als Randbedingungen findet hierbei die periodische Fortsetzung Anwendung.
 - Durch konsequente Verfolgung des Ansatzes zusätzlicher Freiheitsgrade gelangt man zum großkanonischen Ensemble mit veränderlicher Teilchenzahl [102][103].

In Festkörpern sowie Gasen und Flüssigkeiten können die obigen Arten der molekulardynamischen Simulation angewandt werden, um thermodynamische Größen nahe dem Gleichgewicht aus zeitlichen Mittelwerten bzw. den zugehörigen Fluktuationen zu ermitteln. Ein Beispiel für ein Metall ist [104]. Typische Größen für Festkörper sind die elastischen Konstanten [101][105] [106][107], welche nach der Verifikation mit Messungen für Zustände berechnet werden können, die der Messung schwer zugänglich sind. Ein weiteres Anwendungsgebiet ist die Simulationen von Zuständen fern vom Gleichgewicht [108][109].

Da die Integration der Bewegungsgleichungen auf numerischem Weg geschieht, sind Algorithmen nötig, die diese Integration ausführen. Eine Zusammenfassung findet man in [72]. In dieser Arbeit wurde ein Prädiktor-Korrektor Schrittverfahren von Refson [110] benutzt. Die Relaxation in der Molekularstatik kann über verschiedene Minimierungsverfahren erreicht werden. Dazu gehören das Gradientenverfahren, das auch als dynamische Simulation mit einer großen geschwindigkeitsproportionalen Dämpfungskraft modelliert werden kann, das Verfahren konjugierter Gradienten [111][112] und ein ebenfalls dynamisches gradientenähnliches Verfahren, bei dem für den Schritt durch das Minimum entlang der momentanen Relaxationsrichtung die Geschwindigkeiten auf Null gesetzt werden [130].

2.3.2 Randbedingungen der Simulationszelle

Die heutigen Rechner ermöglichen Simulationen, die mit maximal einigen Millionen Atomen in der Lage sind, ausgedehnte Defektstrukturen, in dieser Arbeit sind es Versetzungen, zu beschreiben. Gleichzeitig sind die Simulationszellen mit einigen nm Kantenlänge noch so klein, daß sie auf sinnvolle Weise in das Kontinuum eingebettet werden müssen. Der Abschluß der Simulationszelle durch geeignete Randbedingungen hat deutlichen Einfluß auf deren mechanischen Eigenschaften. Randbedingungen können verschiedene Ansätze widerspiegeln,

- freie Oberflächen,
- periodische Randbedingungen,
- statische Randbedingungen,
- flexible statische Randbedingungen,
- dynamische Randbedingungen.

und Kombinationen davon.

Freie Oberflächen Entspricht die Begrenzung der Simulationszelle einer freien Oberfläche, so handelt es sich physikalisch gesehen um die Simulation eines Partikels oder Moleküls mit einem Volumen von einigen nm³. [113][114] nutzen teilweise diese Randbedingungen. Abhängig vom gewählten Potential findet eine Relaxation der oberflächennahen Atome statt. Gleichzeitig sind die Oberflächen spannungsfrei, d.h. für Defekte wie z.B. Versetzungen ergeben sich deutlich andere Spannungszustände, als sie im ausgedehnten Festkörper vorkommen würden. Für eine $[\bar{1}01]$ -Stufenversetzung in Kupfer führt dies z.B. dazu, daß die Auslenkungen der Atome in $[111]$ -Richtung $\mathbf{u}_{[111]}$ nicht den aus der Elastizitätstheorie erwarteten logarithmischen Verlauf zeigen, siehe auch Anhang A.1, sondern sich bis zum Rand linear fortsetzen.

Dieses Verhalten führt zwangsläufig auch zur Änderung des Spannungszustandes im Versetzungskern, bekannt als Spiegelkräfte in der Elastizität [1]. Auch die Aufspaltungsweite einer Stufenversetzung in Kupfer ändert sich deutlich, wie man in Abbildung 2.7 sieht. Die Bestimmung kleiner Größen, wie z.B. der kritischen Energien und Spannungen analog zum Peierls-Nabarro Modell, erhält somit eine systematische Fehlerquelle. Daneben eignet sich diese Art der Randbedingungen nicht für die Simulation unter externen Spannungen oder Verschiebungen, da diese mangels Referenzrahmens nicht aufgeprägt werden können. Unter diesen Einschränkungen werden die freien Ränder für ausgewählte Orientierungen zusammen mit den nachfolgend beschriebenen Randbedingungen zur

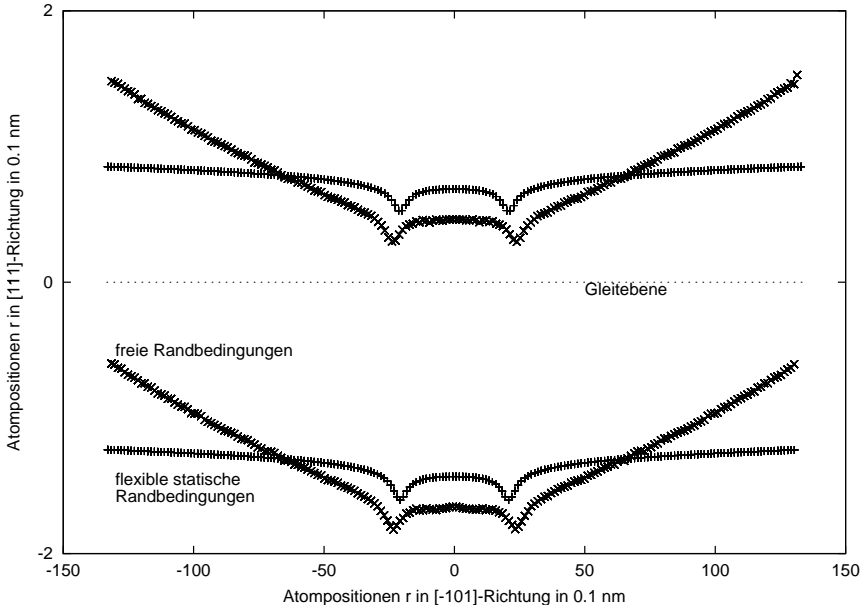


Abbildung 2.7: Darstellung der Atompositionen $r_{[111]}(r_{[101]})$ einer aufgespaltenen Stufenversetzung in Kupfer der $[111]$ -Ebenen zu beiden Seiten der Gleitebene. Die Randbedingungen sind frei bzw. flexibel statisch (S. 19 bzw. S. 22).

vereinfachten Beschreibung großer Simulationsbereiche [115][6] oder bei stark dynamischen Vorgängen [13] gewählt.

Periodische Randbedingungen Die einfachste und eleganteste Art aus dem endlichen Simulationsvolumen einen Teil eines unendlich ausgedehnten Raumes zu machen sind periodische Randbedingungen. Diese nutzen natürliche im physikalischen System vorkommende Symmetrien um das Volumen zyklisch fortzusetzen. Für Gase, Flüssigkeiten und amorphe Festkörper sind dies die Raumrichtungen, für Kristalle die Gittervektoren. Sind die Dimensionen der Simulationszelle groß bezüglich der maximalen Wechselwirkungsabstände der verwendeten Potentiale und der simulierten Strukturen, können die sogenannten Größeneffekte vernachlässigt werden. Betrachtet man die erzeugenden Vektoren des Volumens als freie Parameter, so können zusätzlich Spannungen und homogene Verschiebungen realisiert werden [101][98]. Möglich sind hierbei auch Transformationen, die über die lineare Elastizität hinausgehen, d.h. nichtlineare Elastizität

[116] und Drehungen um feste Ebenen [117], wie sie in der Abgleitung während martensitischer Umformungen vorkommen. Leider ist diese Methode nicht auf Problemstellungen anwendbar, welche die Symmetrie brechen, wie z.B. durch Einfügen von Halbebenen im Fall der Stufenversetzung oder der spiralförmigen Ebenenanordnung der Schraubenversetzung. Es würde eine regelmäßige Anordnung von Versetzungen mit zwischenliegenden Grenzflächen entstehen, was neben der wirklichkeitsfremden Versetzungsverteilung zusätzliche große resultierende Grenzflächenkräfte zur Folge hätte. Um die Beschreibung dennoch durchzuführen müssen Multipole von Versetzungen betrachtet werden, so daß sich die Symmetriebrechungen kompensieren. In erster Näherung ist die Kompensation durch einen Dipol gegeben, der den Burgersvektor des Gesamtumlaufs ausgleicht [117][118]. Während vollständige Periodizität für Versetzungssimulationen nicht in Frage kommt, ist für die üblicherweise simulierten geraden Versetzungen eine zyklische Fortsetzung entlang der Orientierung der Versetzungslinie wünschenswert. Diese Art der periodischen Fortsetzung entlang nur einer Raumrichtung wird auch in dieser Arbeit verwendet.

Statische Randbedingungen

Kennt man die ungefähre Position der Randatome aus einer Kontinuumsstheorie, meist anisotrope lineare Elastizität, so kann man den Atomen innerhalb einer Randschicht, siehe Abbildung 2.8, deren Dicke durch den Abschneideradius des Potentials bestimmt wird, ein festes Verschiebungsfeld zuweisen. Diese Randbedingungen finden häufige Anwendung für einzelne begrenzende Ebenenscharen [121][120][119][14][122] [76] oder sogar nur einzelne Vektorkomponenten in den Verschiebungsfeldern dieser [123][124]. Diese Methode hat zwei Schwachstellen. Zum einen besteht das Problem, daß sich die gewählten Randbedingungen auf einen einzigen Zustand beziehen, der zu Simulationsbeginn schon bekannt sein muß. Dies ist nur möglich, wenn der Rand von den simulierten Effekten in der Mitte des Simulationsvolumens nahezu unabhängig ist. Ergeben sich im Simulationsverlauf substantielle Änderungen innerhalb des betrachteten Volumens, so entstehen am Übergang zum Randbereich Fehlpassungen. Folge dieser Fehlpassungen sind rüchtreibende Kräfte auf Versetzungen, wie man deutlich bei der Bestimmung der Peierlsspannung σ^p in [122] sieht. Diese steigt mit der Annäherung an den Rand deutlich an. Es gibt also ähnlich wie bei den freien Rändern Spiegelkräfte, die bis in den Versetzungskern zurückwirken. Zu anderen stellen die statischen Ränder Reflektionshinder-nisse für die dynamischen Vorgänge im Inneren dar. Die von den Versetzungen bei der Bewegung abgestrahlten Wellen werden an den starren Rändern reflektiert, ebenso wie die thermischen Bewegungen. Beim Verrichten von Arbeit, z.B. bei Bewegung einer Versetzung im externen Spannungsfeld, muß ein effektiver Kontrollmechanismus wie der Nosé-Hoover-Thermostat eingesetzt werden, um

physikalisch sinnvolle Bedingungen zu erhalten. Ebenfalls unklar ist, ob durch die thermische Anregung gegebenenfalls stehende Wellen zwischen den statischen Rändern entstehen. Entweder sollten diese Randbedingungen nur in molekularstatischen Rechnungen Anwendung finden, oder durch geeignete Zusatzmechanismen, wie die randnahe abgestimmte Dämpfung, erweitert werden [125].

Flexible statische Randbedingungen Um die entstehenden Fehlpassungen zu vermeiden, wie sie im vorhergehenden Abschnitt beschrieben wurden, gibt es Ansätze, die den statischen Rand der Simulationszelle nachbessern.

Aus der Literatur sind folgende Verfahren bekannt. Die Idee dieser Verfahren ist es, daß man den Rand, die Fläche **II** in Abbildung 2.8, verdoppelt in die Gebiete **II** und **III**. Diese Trennung ist notwendig, um die in der Grenzschicht **II** auftretenden atomistischen Kräfte bzw. Energien zu ermitteln. Dazu benötigt man die Atome der Zone **III**. Molekulardynamische Integration der Bewegungsgleichungen findet jedoch nur im Gebiet **I** statt.

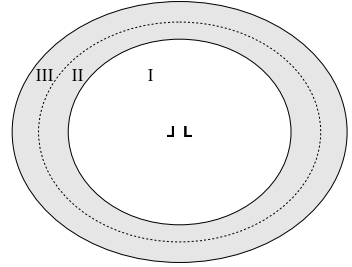


Abbildung 2.8: Atomistik (weiß) und statischer Rand (grau).

Green Der Ansatz mit elastostatischen Greenschen Funktionen [126] für Liniengkkräfte, siehe Teil von Gleichung A.9, und für Punktkräfte berechnet die zusätzlichen Verschiebungen für alle drei Gebiete, welche sich aus der Relaxation der Kräfte in der Randzone **II** ergeben.

Lagrange Ein Lagrange Ansatz [127] formuliert das Verschiebungsfeld des Randgebietes als Funktion weniger Parameter, welche die lineare Versetzungslösung, darauf aufbauende nichtlineare Terme und eine externe homogene Spannung beschreiben. Die zu den Parametern koordinierten Kräfte leiten sich aus der Variation des atomistischen Potentials in der Randzone **II** ab. Die resultierende Verschiebung wird für die Gebiete **II** und **III** im Sinne einer Bewegungsgleichung für die Parameter ermittelt.

In den Simulationen dieser Arbeit kommt ein anderes Verfahren zum Einsatz. Da bei jedem Zeitschritt die Lage der Partialversetzungen mit dem Algorithmus aus Abschnitt 2.2.2 ermittelt werden kann, wird diese Information vor jedem neuen Zeitschritt dazu eingesetzt, um für die Randatome im Gebiet **II** in Abbildung 2.8 eine Näherung in Form der analytisch bestimmbaren anisotropen linear elastischen Lösung zu berechnen (A.1, S.84). Der Nachteil dieses Verfahrens besteht darin, daß die Nichtlinearität des Kerns bei der Bestimmung

der Verschiebungen der Randatome nicht berücksichtigt wird. Insbesondere eine nichtlineare Volumenänderung des Kerns wird zumindest teilweise unterdrückt bzw. muß durch Verschiebungen randnaher Atome kompensiert werden. Dem gegenüber steht der Vorteil, daß mit der bekannten analytischen Lösung der anisotropen linearen Elastizität für eine beliebige Anzahl von Versetzungen eine effektive Anpassung des Randbereiches in wenigen Berechnungsschritten möglich ist. Daneben kommt das Verfahren mit der halben Anzahl an Randatomen aus. Das Verfahren wurde dem Verfahren **Green** vorgezogen, da die Berechnung der 3-dimensionalen Greenschen Funktion \mathbf{G}_{ij} selbst mit modernen Verfahren [128] deutlich mehr Rechenaufwand erfordert. Hinzu kommt, daß für jede Neuberechnung des Randes eine für diesen Ansatz charakteristische Faltung notwendig ist, die aus

$$u_i(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{V}(\Pi)} d\mathbf{r}'^3 G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') u_j(\mathbf{r}') \quad \forall \mathbf{r} \in \mathcal{V}^{(\mathbf{I}+\Pi+\mathbf{III})} \quad (2.12)$$

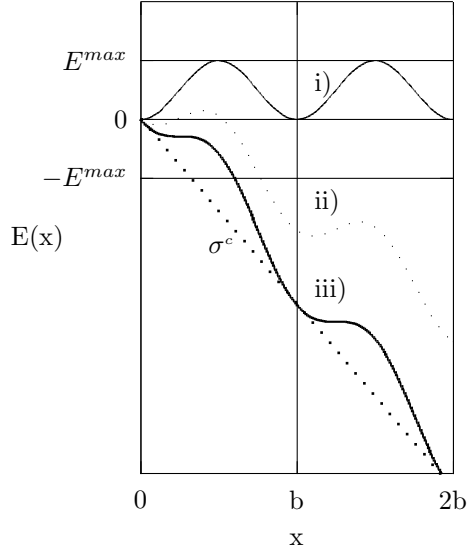
resultiert und welche ebenfalls starke Beschränkungen bezüglich Simulationsgröße und -dauer impliziert. Das Verfahren **Lagrange** hat sich für den vorliegenden Fall weit aufgespaltener Versetzungen weder für die Versetzungsparameter noch die nichtlinearen Parameter als anwendbar erwiesen. Die betrachteten Parameter mit dem doppelten Ursprung in den jeweiligen Kernen der Partialversetzungen sind nicht mehr entkoppelt, da sie je Partialversetzung ähnliche Wirkungen haben. Es hat sich gezeigt, daß das Verfahren **Lagrange** für aufgespaltene Versetzungen numerisch nicht stabil ist.

Den Verfahren ist gemeinsam, daß sie nur für quasistatische Rechnungen und Molekularstatik gute Ergebnisse liefern. Die dynamischen Defizite der statischen Lösung bleiben bestehen.

Dynamische Randbedingungen Zwei Ansätze sind bisher gemacht worden, um eine vollständige dynamische Ankopplung der Simulationszelle an ein umgebendes Kontinuum zu modellieren [9][129]. Beide nutzen **Finite-Element-Methoden**. Die Reißsimulation [9] im bcc-Kristall benutzt eine direkte Abbildung der Atome auf die Knotenpunkte der FEM. Zusammen mit nichtlinearen und nichtlokalen Ansätzen in der Elastizitätstheorie der FEM wurden die gewünschten Übergangseigenschaften zwischen molekulardynamischen und Randatomen erzielt. Die sogenannte Quasikontinuums-Methode [129] setzt eine Vergrößerung der Strukturen ein. In einer Randzone werden immer größere Atomzahlen zu nichtlokalen Einheiten zusammengefaßt und so der Übergang zur FEM bewerkstelligt. Da beide Methoden von erheblicher Komplexität sind, sei für die Details auf die jeweiligen Artikel verwiesen.

2.3.3 Bestimmung einer Sattelpunktlage

Zwischen zwei benachbarten stabilen Lagen einer Versetzung liegt eine Energiebarriere, z.B. ist dies im Fall des Modells von Peierls und Nabarro die Peierlsenergie. Diese Energiebarriere hat eine charakteristische Form, die beispielhaft in Abbildung 2.9.i gezeigt ist. Die maximale Ableitung der Barriere bezüglich der Reaktionskoordinate, welche im vorliegenden Fall die Schwerpunktslage der Versetzung ist, ergibt eine kritische koordinierte Kraft, d.h. für die Versetzung eine kritische Spannung $\sigma^c = \text{const.} \cdot \max_x \left(\frac{dE(x)}{dx} \right)$. Legt man an die Versetzung verschiedene stetig



steigende Spannungen an (Abb. 2.9.ii), so wird bei Überschreiten von σ^c (Abb. 2.9.iii) die Versetzung beschleunigt ohne erneut zu stoppen. Mit dieser an die Natur angelehnten Methode läßt sich nur ein Teil der Energiebarriere ermitteln.

Abbildung 2.9: Peierlsbarriere unter steigender externer Spannung

Für die Abschätzung anderer Phänomene, wie z.B. eine mögliche Kinkpaarbildung [1], thermische Aktivierung oder die Art des Umordnungsmechanismus, d.h. einem möglichen Umklappen der eingeschobenen Halbebenen, ist die Kenntnis des gesamten Verlaufes der Energiebarriere wichtig. Für die Bestimmung kommt erschwerend hinzu, daß die Energiebarriere, anders als im eindimensionalen Peierls-Nabarro-Modell für die Versetzung, im atomistischen Modell ein Energiepfad in einem erweiterten Phasenraum ist, d.h. in einer Simulation mit N Atomen wird ein Pfad in einem $(6N + 1)$ -dimensionalen Raum gesucht. Die oben dargestellte Methode sukzessiv gesteigerter Spannungen kann nicht zur Bestimmung des Minimal-Energie-Pfades herangezogen werden, da mit der Beschleunigung die kinetische Energie stark variiert und damit der vorliegende MEP keine Aussagekraft hat. Für eine quasistatische Abtastung des Übergangs zwischen den beiden stabilen Konfigurationen erhält man einen eindeutigen und reproduzierbaren MEP. Die Eindeutigkeit resultiert aus der Tatsache, daß alle $3N$ Impuls-Freiheitsgrade wegfallen, da die kinetische Energie und damit die Geschwindigkeiten null sind. Der Pfad minimaler Energie, der MEP, ist damit

in einem Gebiet des verbleibenden $(3N + 1)$ -dimensionalen Raumes definiert durch die Eigenschaft, daß die N Kräfte auf die Atome keine Komponenten senkrecht zum Pfad haben. In anderen Worten heißt dies, daß eine Art Integral des größtmöglichen Verlustes an potentieller Energie E^{pot} minimal ist,

$$\int_{\text{Pfad } \xi} d\xi \frac{\partial E^{\text{pot}}}{\partial x_i} . \quad (2.13)$$

Dieses kann als Abschätzung der Energiebarriere für eine Temperatur von 0 K in weitergehende Betrachtungen einfließen. In dieser Arbeit werden von den verschiedenen existierenden Methoden zur Bestimmung von MEP oder Sattelpunktslage [130] zwei ausgewählt, deren Anwendung im Fall einer atomistischen Simulation als besonders geeignet erscheinen:

- das überdämpfte dynamische System und
- das Verfahren des sanft geschobenen elastischen Bandes (**Nudged-Elastic-Band-Method**).

Zwei einfachere Methoden werden ebenfalls im Zusammenhang mit Versetzungen verwendet. In [132] wird ein Modell, das erweiterte Peierls-Nabarro Modell, benutzt, um die Sattelpunktslage und die relevanten Parameter der MEP anzunähern. Als vereinfachte Version der unten beschriebenen Verfahren ist die Interpolation der Zwischenzustände anzusehen [91][133].

Überdämpftes dynamisches System

Um ein quasistatisches Abtasten des MEP zu erreichen, wird eine normale atomistische Simulation des Gebietes von N Atomen durchgeführt, wobei die Bewegungsgleichungen durch einen linearen Dämpfungsterm erweitert werden:

$$m \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i - \gamma \dot{\mathbf{r}}_i, \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.14)$$

Die Dämpfungskonstante γ muß so gewählt werden, daß ein Kriechfall eintritt, d.h. die Integrationsschritte sollten nicht über die jeweiligen Minima entlang der Schrittrichtung $\dot{\mathbf{r}}_i$ hinausgehen. Die gesamte im System verbleibende kinetische Energie wird sich bei konstanter treibender Kraft und damit konstanter Verrichtung von Arbeit am System nach den zusätzlichen Relaxationsvorgängen auf einem geringen konstanten Niveau einstellen. Die gesuchte Energiebarriere findet sich angenähert in der Fluktuation der potentiellen Energie in Abhängigkeit von der Reaktionskoordinate, d.h. hier der Versetzungsordinate.

Nudged-Elastic-Band Methode

Neben der sequentiellen Abtastung des MEP im vorhergehenden Abschnitt ist eine parallele Anordnung denkbar. Dabei werden M Simulationszellen mit jeweils N Atomen gekoppelt [131][130]. Die grundlegende Idee besteht darin, eine Kette von Systemen in festen Abständen entlang des MEP zu verteilen. Abbildung 2.10 zeigt ein solches Vorgehen. Ließe man die einzelnen Systeme vollständig relaxieren, so würden sie je nach Lage zum Sattelpunkt in einer der stabilen Konfigurationen enden. In der Nudged-Elastic-Band Methode wird dies verhindert, indem der $3N$ -dimensionale Kraftvektor

$$\vec{\mathbf{F}}_j^{\text{Potential}} = -\nabla_{\vec{\mathbf{r}}_j} V(\vec{\mathbf{r}}_j) \quad (2.15)$$

des Systems j , welcher an den N Atomen mit dem $3N$ -dimensionalen Ortsvektor $\vec{\mathbf{r}}_j$ angreift, auf senkrecht zu dem durch die Glieder der Kette aufgespannten Pfad projiziert wird. Entlang des Pfades wird eine harmonische Federkraft geringer Stärke eingesetzt, um die Systeme der Kette gleichmäßig auf dem MEP zu verteilen. Für die begrenzenden Simulationszellen 1 und M gelten die normalen

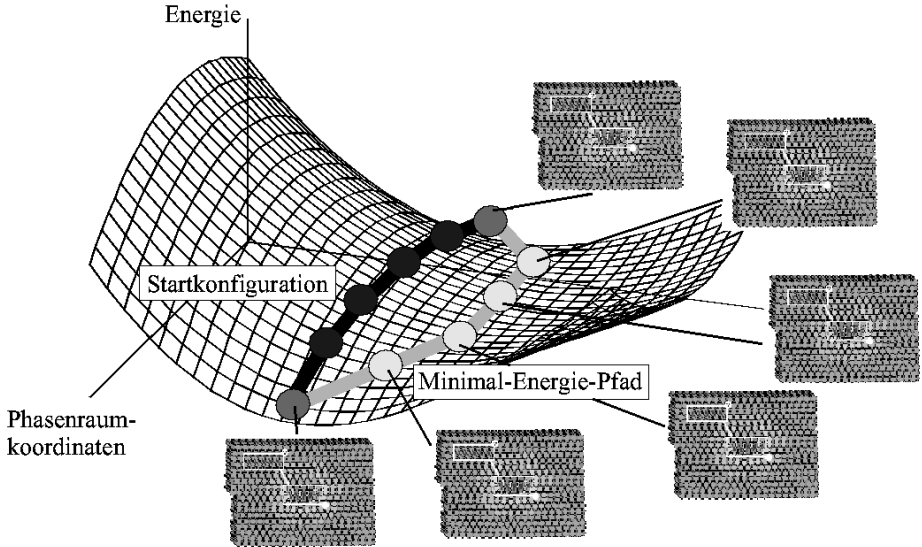


Abbildung 2.10: Bestimmung der Sattelpunktslage durch die Nudged-Elastic-Band Methode.

Kraftgesetze $\vec{\mathbf{F}}_{1/M}^{\text{NEB}} = \vec{\mathbf{F}}_{1/M}^{\text{Potential}}$ aus (2.15), für die anderen

$$\vec{\mathbf{F}}_j^{\text{NEB}} = (\vec{\mathbf{F}}_j^{\text{Potential}})_\perp + (\kappa_j(\vec{\mathbf{r}}_{j+1} - 2\vec{\mathbf{r}}_j + \vec{\mathbf{r}}_{j-1}))_\parallel. \quad (2.16)$$

Während der erste Term die Lage des Pfades im Raum der Ortkoordinaten und der potentiellen Energie bestimmt, leistet der zweite Term die Verteilung der Simulationszellen als Stützstellen des Pfades. Für die übliche Wahl einer kleinen Federstärke $\kappa = \kappa_j$ erreicht man eine Gleichverteilung der Simulationszellen entlang des Pfades. Durch die Projektion der Potentialkraft $(\vec{\mathbf{F}}_j^{\text{Potential}})_\perp$ wird erreicht, daß die Simulationszelle j gegen das ihr nächste Minimum bei Zelle 1 oder M konvergiert, die Projektion der Federkraft verhindert bei ausreichend großem M das Schneiden von Ecken im Potentialprofil. Durch die Entkopplung wird auch mit einer geringen Anzahl an Simulationszellen M eine gute Annäherung an den MEP gewährleistet, der nach gleichen Bedingungen definiert ist, siehe Seite 24.

Zu beachten ist, daß es in komplexeren Potentialhyperebenen zu zwei Endpunkten mehrere Pfade geben kann, die jeweils das Kriterium eines MEPs erfüllen. Hier ist die Wahl des Pfades entscheidend, mit dem man die Iterationsprozedur beginnt. Ein Beispiel dafür findet sich auf Seite 55.

Für die Simulation von Versetzungen wurde die NEB Methode bisher erfolgreich angewandt für die Untersuchung des Kletterns von aufgespaltenen Schraubenversetzungen in Kupfer [93][115] und der Kinkpaarbildung im kubisch-raumzentrierten Eisen [134].

Kapitel 3

Stabile Konfigurationen gerader Versetzungen in reinem Kupfer

In der klassischen Theorie der Versetzungen gibt es zwei konkurrierende Kräfte, welche die Ruhelagen von aufgespaltenen Versetzungen in $[111]$ -Ebenen von kubisch flächenzentrierten (fcc) Kristallstrukturen bestimmt:

- die abstoßende elastische Wechselwirkung zwischen den Versetzungen, welche durch die Peach-Köhler Kraft auf eine Versetzung im Spannungsfeld der jeweils anderen gegeben ist,
- und die Kraft auf die Versetzung aufgrund der Stapelfehlerenergie γ , der atomistischen Energie, die aus den Änderungen der Nachbarschaftsverhältnisse der Atome aufgrund des Wechsels von einer Stapelfolge **ABC** auf **ABA** (siehe Abbildung 2.6) resultiert.

Abbildung 3.1 der zugehörigen Gesamtenergie zeigt, daß diese ein eindeutiges Minimum besitzt. Die Berechnung der Peach-Koehler Kraft geht davon aus, daß die Energieänderung der Versetzung bei Bewegung um den infinitesimalen Vektor $\delta \mathbf{r}$ im lokal konstanten Spannungsfeld σ gleich der Kraft \mathbf{F} auf die Versetzung ist. Bei einer geraden Versetzung mit Länge L , Linienvektor ξ , Burgersvektor \mathbf{b}_1 in der Ebene $\mathbf{n}^{[111]} \cdot \mathbf{r} = 0$ ist die Energieänderung pro Längeneinheit

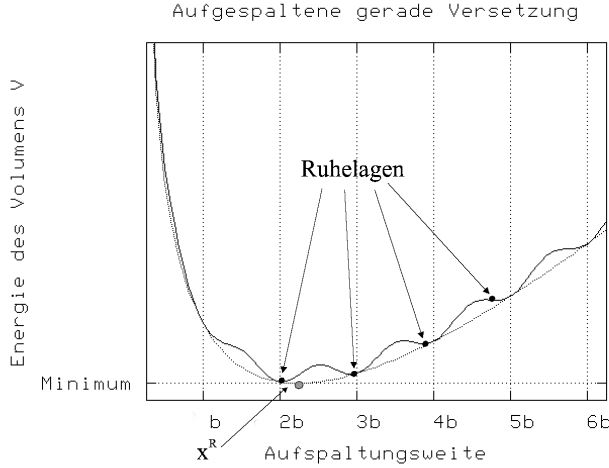
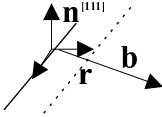


Abbildung 3.1: Skizze möglicher stabiler Aufspaltungsweiten für eine gerade Versetzung bei positiver Stapelfehlerenergie.



$$\begin{aligned} \frac{\delta W}{L} &= (\sigma \cdot (\xi \times \delta \mathbf{r}) \cdot \mathbf{b}_1 \\ &= (\sigma \cdot \mathbf{n}^{[111]}) \cdot \mathbf{b}_1 |\delta \mathbf{r}|. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Wie aus A.1 ersichtlich gilt für die Kraft in der Gleitebene einer parallelen Versetzung im Abstand x mit Burgersvektor \mathbf{b}_2

$$\sigma \cdot \mathbf{n}^{[111]} = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\alpha=1}^6 \pm \mathbf{L}^{(\alpha)} (\mathbf{L}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{b}_2) \frac{1}{x}. \quad (3.2)$$

Die Energieänderung aufgrund des Stapelfehlers für die gleiche Fläche $|\delta \mathbf{r}| L$ ist

$$\frac{\delta W}{L} = \gamma |\delta \mathbf{r}|. \quad (3.3)$$

Damit folgt für die Aufspaltungsweite der Ruhelage

$$x^R = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\alpha=1}^6 \pm (\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{L}^{(\alpha)}) (\mathbf{L}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{b}_2) \frac{1}{\gamma}. \quad (3.4)$$

Mit den elastischen Konstanten, Stapelfehlerparametern und Gitterkonstante für Kupfer

c_{11}	c_{12}	c_{44}	γ^{FS}	a_0
168,4 GPa	121,4 GPa	75,4 GPa	$36 \frac{\text{mJ}}{\text{m}^2}$	3,615 Å

erhält man bei der Aufspaltung $\mathbf{b}_0 \rightarrow \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$ für gerade Stufen- und Schraubenversetzungen für den kontinuumsmechanischen Ansatz:

Versetzungstyp	ξ	$\mathbf{b}_0 \rightarrow \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$	x^R	Messung
Schraube (0°)	$\frac{1}{\sqrt{2}}[\bar{1}01]$	$\frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2] + \frac{1}{6}[\bar{2}11]$	12,3 Å	18 ± 6 Å [135]
Stufe (90°)	$\frac{1}{\sqrt{6}}[1\bar{2}1]$	$\frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2] + \frac{1}{6}[\bar{2}11]$	42,8 Å	38 ± 6 Å [135]
Gemischt (60°)	$\frac{1}{\sqrt{6}}[1\bar{2}1]$	$\frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2] + \frac{1}{6}[1\bar{2}1]$	36,3 Å	34 ± 7 Å [136]

Nimmt man jedoch die atomistische Struktur hinzu, wie sie in der einfachen Form durch das Peierls-Nabarro Modell (2.1.2) beschrieben wird, so wird dem Energieverlauf eine periodische Abfolge von Energiebarrieren überlagert (Abb. 3.1). Das Resultat ist die Existenz mehrerer lokaler Minima, die durch ihre Lage im Kristallgitter und die Aufspaltungsweite bestimmt sind. In der atomistischen Simulation sind die Komponenten, elastische Wechselwirkung, Stapelfehlerenergie sowie periodische Energiebarrieren, direkt vorhanden, so daß sich sowohl für die betrachteten geraden Stufenversetzungen, als auch für die geraden Schraubenversetzungen mehrere Ruhelagen ergeben sollten.

Als Grundlage für alle weiteren Simulationen ist es notwendig diese stabilen Lagen systematisch zu bestimmen. Dazu wurden verschiedene Simulationszellen einer einheitlichen Größe von ca. 240000 Atomen jeweils einem Relaxationsprozeß unterzogen. Ausgangspunkte waren jeweils die Verschiebungen der anisotropen elastischen Lösungen aus A.1 für eine Variation von Aufspaltungsweiten und Versetzungspositionen.

3.1 Gerade Stufenversetzung

Aufspaltungsweite In Abbildung 3.2 sieht man 19 Start- und Endkonfigurationen der Versetzungslinien einer aufgespaltenen Stufenversetzung (siehe auch Abb. 3.3(i)). Die Startkonfigurationen haben alle eine Aufspaltungsweite d_0 von 42.4 Å und sind gegeneinander mit einem Abstand von 0.64 Å verschoben angeordnet. Der nächste Abstand zweier benachbarter Atome im ungestörten Kristallgitter von Kupfer beträgt $b_0 = \frac{a_0}{\sqrt{2}} \approx 2.56\text{Å}$. Dies ist auch die Länge

des gesamten Burgersvektors. Durch die Aufspaltung erwartet man eine stabile Lage pro Partialversetzung im Abstand von $\frac{b_0}{2}$. Die untere Hälfte von Abb. 3.2 zeigt die relaxierten Konfigurationen nach mehr als 16000 Schritten. Es treten nur zwei Aufspaltungsweiten d auf: 41,0 Å und 41,8 Å.

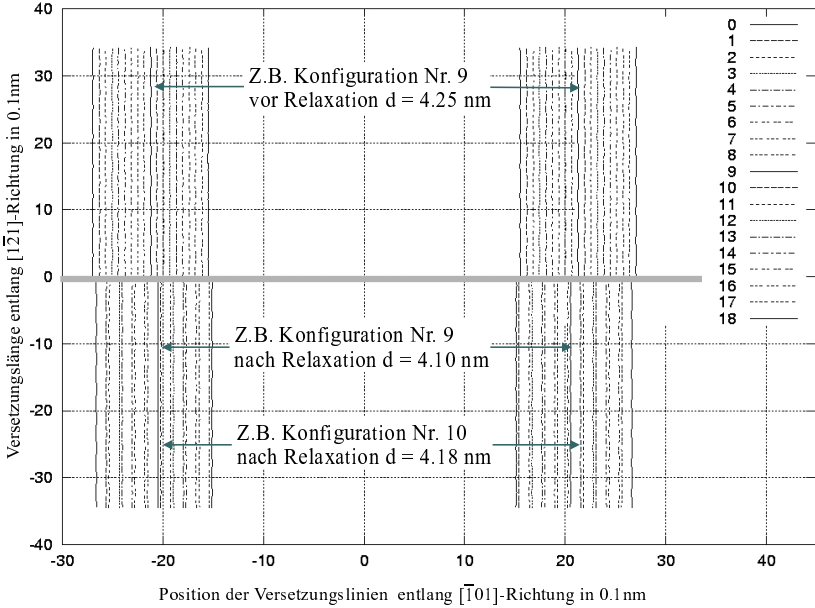


Abbildung 3.2: Versetzungskonfigurationen gleicher Aufspaltungsweite an verschiedenen Positionen.

Ein weiterer Versuch, Abb. 3.3(ii), mit einer Anfangsaufspaltungsweite d_0 von 40,7 Å liefert für 7 Simulationen mit ebenfalls um 0,64 Å translatierten Stufenversetzungen liefert auch eine Aufspaltungsweite $d = 41,0$ Å. Im dritten Versuch, Abb. 3.3(iii), wurde für 19 Konfigurationen unter Festhalten der Lage einer Partialversetzung eine Variation der Anfangsaufspaltungsweiten d_0 zwischen 36,6 Å und 48,2 Å mit Hilfe der elastischen Lösung modelliert. Bei den Relaxationsrechnungen dieser Konfigurationen findet sich eine weitere stabile Lage im Bereich $d = 40,3$ Å. In Abbildung 3.3 sind alle relaxierten Konfigurationen eingetragen. Man erkennt, daß im Gegensatz zu den Versuchen (i) und (ii) die Aufspaltungsweiten d der relaxierten Systeme aus (iii) erhebliche Streu-

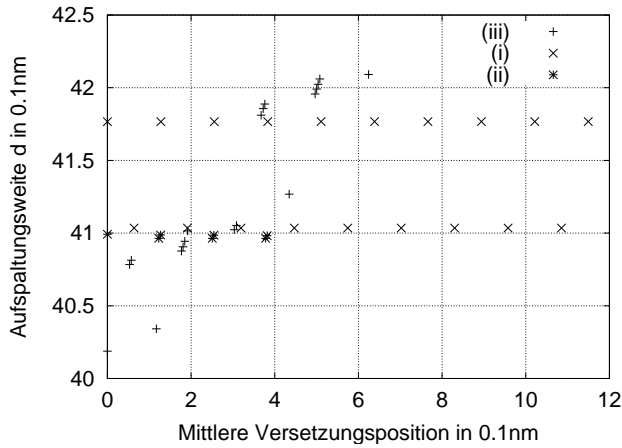


Abbildung 3.3: Stabile Aufspaltungsweiten für eine gerade Stufenversetzung in der (111)-Ebene von Kupfer, aufgetragen über dem Abstand der Gesamtversetzung vom Mittelpunkt der Simulationszelle. Die Fälle (i)-(iii) bezeichnen die im Text bzw. in Abb. 3.2 beschriebenen Scharen von Anfangskonfigurationen.



Abbildung 3.4: Stabile Aufspaltungsweiten für eine gerade Stufenversetzung in Kupfer. Aufsicht auf die Ebene senkrecht zum Linienvektor $[1\bar{2}1]$.

ungen aufweisen. Dies ist begründet in den z.T. großen Unterschieden zwischen Start- und Endkonfiguration, so daß insbesondere für die Startkonfigurationen mit $d < 40\text{\AA}$ oder $d > 44\text{\AA}$ auch nach ca. 25000 Relaxationsschritten noch nicht die bestmögliche Endkonfiguration erreicht wurden.

Die atomistische Bedeutung der drei gefundenen Aufspaltungsweiten d kann man erkennen, wenn man entlang der Versetzungslinie auf den Versetzungskern blickt. Abbildung 3.4 (S. 32) zeigt, daß die einzelnen Partialversetzungen so liegen, daß sich bezüglich der eingeschobenen Halbebene eine symmetrische Anordnung ausprägt. Nach der Klassifikation aus Abbildung 3.5 kann man den Fällen a)-c) aus Abbildung 3.4 die Kombinationen

a)	b)	c)
I - I	I - II	II - II
$d = 40,3\text{\AA}$	$d = 41,0\text{\AA}$	$d = 41,8\text{\AA}$

ermitteln. Damit erhält man für die Lage der Partialversetzungen eine Periodizität von ungefähr $\frac{b_0}{4} = 0.64\text{\AA}$ entlang des Burgersvektors $\mathbf{b}_0 = [101]$. Die Abweichungen sind durch die mögliche Genauigkeit der präsentierten Werte und durch die Tatsache bedingt, daß sich die Lagen der Halbebene aufgrund der Konkurrenz zwischen Wechselwirkung der Partialversetzungen und des Stapelfehlers nicht vollständig symmetrisch einstellen werden.

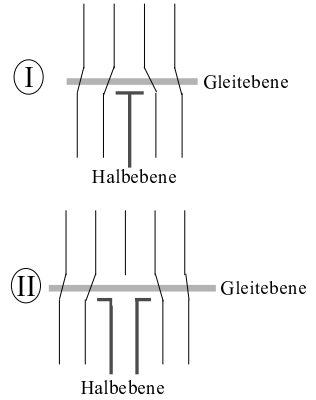


Abbildung 3.5: Symmetrische Anordnungen der Halbebene.

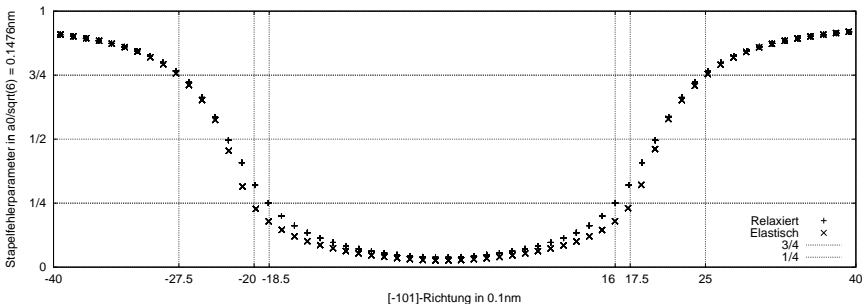


Abbildung 3.6: Stapelfehler Parameter γ_i aus 2.11 für Stufenversetzung.

Weite des Versetzungskerns Betrachtet man für die Aufspaltungsweite $d = 41,0 \text{ \AA}$ den Verlauf des Stapelfehlerparameters γ_i aus Seite 16, so ist die Breite des Bereichs zwischen $\frac{1}{4}\gamma_i/(\frac{a_0}{\sqrt{6}})$ und $\frac{3}{4}\gamma_i/(\frac{a_0}{\sqrt{6}})$ ein Maß für die Kernweite der jeweiligen Partialversetzung. Der Wert von $9 \pm 1 \text{ \AA}$, ermittelt aus Abb. 3.6, kann nicht mit den Kernweiten verglichen werden, die durch Bestimmung der Burgersvektordichte ermittelt werden, z.B. [93][73]. Der in der Literatur beobachtete Faktor > 2 zwischen elastischer Lösung und atomistischer Simulation kann hier nicht beobachtet werden. Prägt man eine anisotrope elastische Lösung mit gleicher Aufspaltungsweite auf die Atomkonfiguration, so reduziert sich die Kernweite auf $7,5 \pm 1 \text{ \AA}$, ebenfalls aus Abb. 3.6, d.h. der Faktor ist nur 1,2. Man kann ebenfalls sehen, daß die Kerne der Partialversetzungen nur geringfügig überlappen.

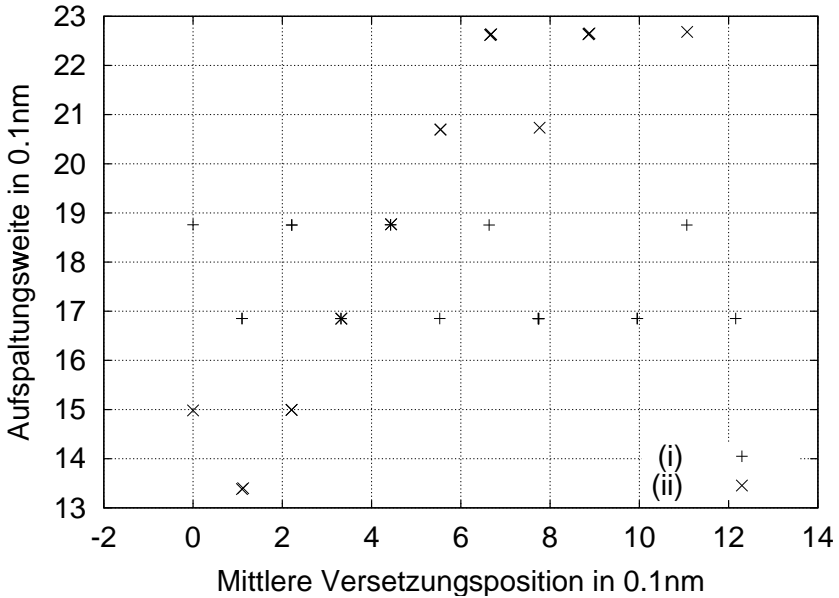


Abbildung 3.7: Stabile Aufspaltungsweiten für eine gerade Schraubenversetzung in der (111)-Ebene von Kupfer aufgetragen über dem Abstand der Gesamtversetzung vom Mittelpunkt der Simulationszelle.

3.2 Gerade Schraubenversetzung

Aufspaltungsweite Für die gerade Schraubenversetzung wurden ebenfalls die verschiedenen möglichen Aufspaltungsweiten d und stabilen Lagen bestimmt.

In Abbildung 3.7 sind zwei Simulationsreihen dargestellt. Zum einen wurden 19 Konfigurationen mit der Aufspaltungsweite $d_0 = 17,1 \text{ \AA}$ angenommen, deren Ausgangskonfigurationen $0,64 \text{ \AA}$ auseinander liegen. Dieser Fall **(i)** liefert, ähnlich dem Fall **(i)** für die aufgespaltene Stufenversetzung, zwei stabile Aufspaltungsweiten $16,9 \text{ \AA}$ und $18,8 \text{ \AA}$ (siehe Abb. 3.7). Die Differenz von $1,9 \text{ \AA}$ läßt auf eine Anordnung entlang der $[\bar{1}21]$ -Richtung mit der Periodizität $a_0\sqrt{\frac{3}{8}} = 2,2 \text{ \AA}$ schließen. Abbildung 3.9 zeigt, daß die stabilen Lagen der einzelnen Partialversetzungen die Periodizität von $a_0\sqrt{\frac{3}{8}}$ sehr gut einhalten. Die Abweichung des Unterschiedes in der Aufspaltungsweite um $0,3 \text{ \AA}$ ist auf die ebenfalls geänderten Wechselwirkungen zurückzuführen. Innerhalb dieses Abstandes von $\frac{a_0}{\sqrt{3}}$ liegen drei $(\bar{1}21)$ -Ebenen, jedoch scheint nur eine von diesen Lagen für die einzelne Partialversetzung stabil zu sein. Zum anderen zeigt der Fall **(ii)** die Variation der Anfangsaufspaltungsweite d_0 zwischen 11 \AA und 31 \AA durch 19 äquidistante Konfigurationen (siehe auch Abb. 3.8). Aus diesem großen Intervall ergeben sich nach ca. 30000 Iterationsschritten 6 stabile Aufspaltungsweiten d : $13,4 \text{ \AA}$, $15,0 \text{ \AA}$, $16,9 \text{ \AA}$, $18,8 \text{ \AA}$, $20,7 \text{ \AA}$ und $22,6 \text{ \AA}$ mit einer methodischen Unsicherheit von jeweils $\pm 0,1 \text{ \AA}$. Die Schwankungen um die jeweils auftretenden mittleren Aufspaltungsweiten d sind maximal von der Größenordnung $\pm 0,03$. In 3.10 sind die zugehörigen Atomanordnungen gezeigt. Anders als bei der Stufenversetzung sind die ausgezeichneten Lagen des Versetzungskerns nicht so gut zu erkennen, d.h. die Variation der Positionen der Partialversetzungen sind auch aufgrund des größeren Aufspaltungsintervalls stärker ausgeprägt. Eine genauere Betrachtung ergibt jedoch ebenfalls eine Kopplung an eingeschobene Halbebenen. Bezüglich der Stufenkomponenten stellen die Partialversetzungen einen Versetzungsdipol dar, bei dem an den Positionen der Partialversetzungen aus jeweils verschiedenen Richtungen $(2\bar{1}2)$ - bzw. (121) -Halbebenen eingefügt sind. In Abbildung 3.11 ist dies am Beispiel der Konfiguration mit der Aufspaltungsweite $16,9 \text{ \AA}$ eingezeichnet. Die anderen Fälle aus Abbildung 3.10 lassen sich auf gleiche Weise deuten. Damit ist auch die Periodizität mit jeder dritten $(\bar{1}21)$ -Ebene aus den geometrischen Überlegungen ableitbar.

Weite des Versetzungskerns Die Weite des Kerns wurde ebenfalls an der Konfiguration mit Aufspaltungsweite $d = 16,9 \text{ \AA}$ bestimmt. Im relaxierten Zustand haben die Partialversetzungen eine Kernweite von $7 \pm 1 \text{ \AA}$, gemessen nach der Methode von Seite 33. Eine Simulationszelle mit aufgeprägter anisotroper

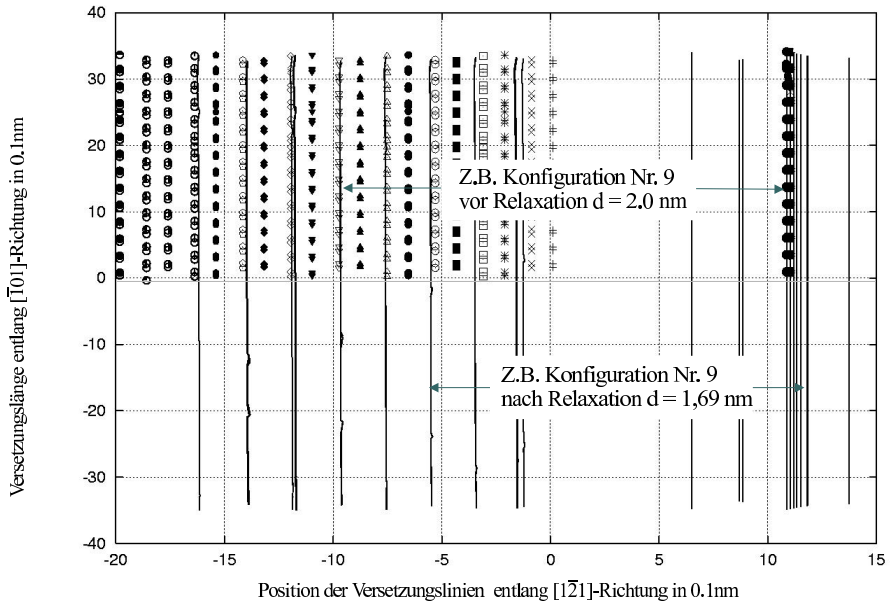


Abbildung 3.8: Versetzungskonfigurationen verschiedener Aufspaltungsweiten.

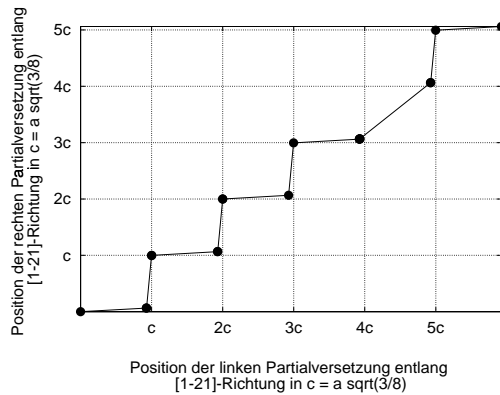


Abbildung 3.9: Stabile Lagen der einzelnen Partialversetzungen der Schraubenversetzung aus Abbildung 3.7(i) gegeneinander aufgetragen.

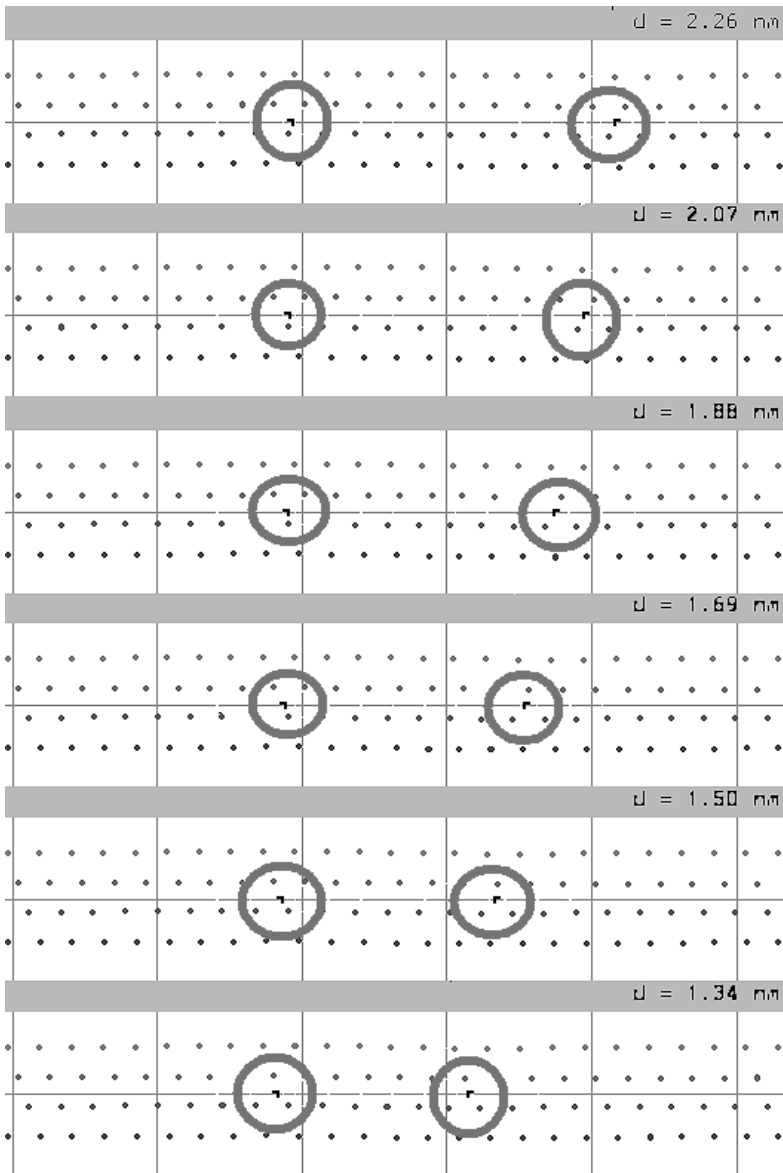


Abbildung 3.10: Stabile Aufspaltungsweiten für eine gerade Schraubenversetzung in Kupfer. Aufsicht auf die Ebene senkrecht zum Linienvektor $[\bar{1}01]$.

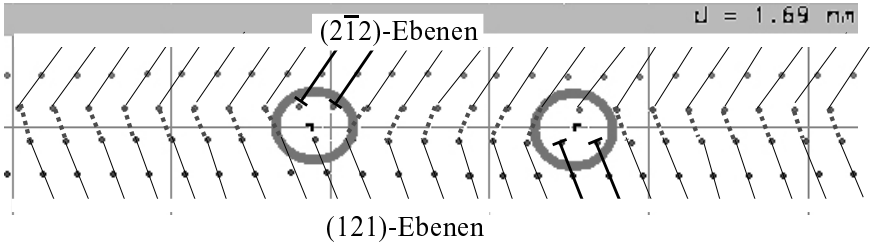


Abbildung 3.11: Eingeschobene ($2\bar{1}2$)- bzw. (121)-Halbebenen an den Versetzungspositionen.

linearer elastischer Lösung von gleicher Aufspaltungsweite ergibt eine Kernweite von $6 \pm 1 \text{ \AA}$, d.h. zwischen elastischer und atomistischer Lösung liegt ein Faktor von ungefähr 1,3. Da die Aufspaltungsweite deutlich geringer ist als für die Stufenversetzung, die Weite der Versetzungskerne jedoch nur um 30%, findet man im Fall der Schraubenversetzung eine größere Überlappung der Kernstrukturen. Diese ist jedoch weiterhin so gering, daß man von deutlich getrennten Versetzungskernen ausgehen kann. Einzig der reine Stapelfehlerbereich mit Werten des Stapelfehlerparameters γ_i nahe Null, ist weniger stark ausgeprägt bzw. γ_i erreicht mit nur $0.15 \frac{a_0}{\sqrt{3}}$ einen höheren Wert als $0.04 \frac{a_0}{\sqrt{3}}$ für die Stufenversetzung (siehe Abb. 3.6). Man kann also annehmen, daß die Wahl der Stufenfunktion zwischen den Partialversetzungen zur Beschreibung der Stapelfehlerenergie in der einfachsten Abschätzung der Aufspaltungsweite aus Gleichung 3.4 diesen Teil der Wechselwirkung überschätzt und somit die Aufspaltungsweiten, wie beobachtet, größer sein sollten.

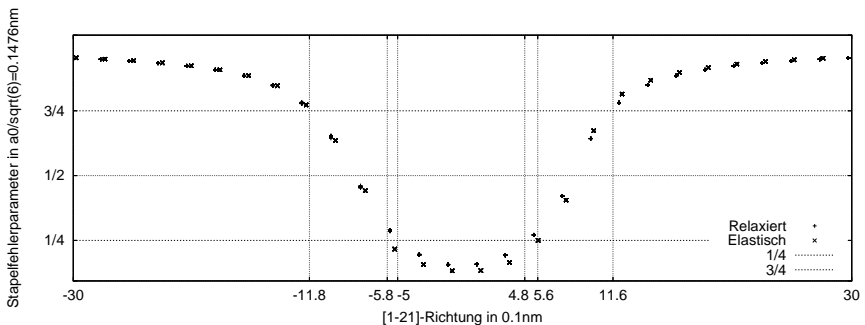


Abbildung 3.12: Stapelfehler Parameter γ_i aus 2.11 für Schraubenversetzung.

3.3 Gemischte Versetzung

Stellvertretend für die gemischten Versetzungen wurde die sogenannte 60° -Versetzung simuliert, bei der der Winkel zwischen gesamten Burgersvektor $\mathbf{b}_0 = \frac{1}{2}[0\bar{1}1]$ und Linienvektor $\xi = \frac{1}{6}[1\bar{2}1]$ 60° beträgt. Die Aufspaltung ist $\frac{1}{2}[0\bar{1}1] \rightarrow \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2] + \frac{1}{6}[\bar{1}2\bar{1}]$. Es wurde eine Relaxationsrechnung mit der Anfangsaufspaltungsweite $d_0 = 24,5 \text{ \AA}$ und der stabilen Aufspaltungsweite $d = 33,6 \text{ \AA}$ durchgeführt. Wie man aus den Abbildungen 3.13 und 3.14 ersehen kann, ist diese Konfiguration im Gegensatz zu Stufen- und Schraubenversetzung nicht symmetrisch, sondern besteht aus einer Partialversetzung (b) von gemischtem Charakter, wie sie bei der Schraubenversetzung auch vorkommt, und einer Partialversetzung (a), die eine reine Stufenversetzung ist.

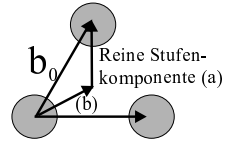


Abbildung 3.13: Aufspaltung der gemischten Versetzung.

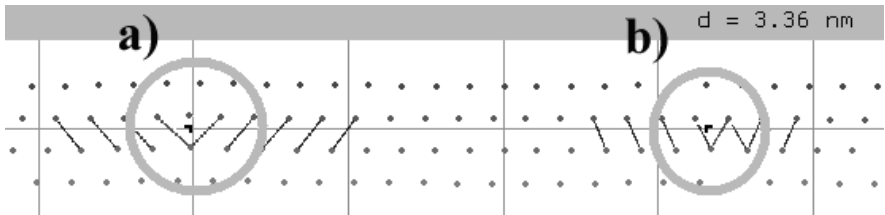


Abbildung 3.14: Stabile Aufspaltungsweite für eine gerade 60° -Versetzung in Kupfer. Aufsicht auf die Ebene senkrecht zum Linienvektor $[\bar{1}01]$.

Diese Unsymmetrie findet sich auch im Profil des Stapelfehlerparameters γ_i wieder. Die Partialversetzung (a) hat die Weiten $9,5 \pm 1 \text{ \AA}$ im atomistischen und $7,5 \pm 1 \text{ \AA}$ im anfänglich elastischen Zustand. Dies stimmt wie zu erwarten gut mit den Werten der Stufenversetzung überein. Der Kern der Partialversetzung (b) ist $6 \pm 1 \text{ \AA}$ im atomistischen und $4,7 \pm 1 \text{ \AA}$ im elastischen Fall, also ähnlich dem der Schraubenversetzung.

3.4 Diskussion der Ergebnisse

In der atomistischen Simulation von Versetzungen in Kupfer gibt es in der Literatur eine Vielzahl von berichteten Aufspaltungsweiten:

- für Stufenversetzungen 20 Å [5], 32 Å [75], 31 – 55(77) Å [119], 23 Å [76], 54 Å [123] und 28.3 Å [93]
- sowie für Schraubenversetzungen 15 Å [75] und 16.0 Å [93].

Die vorliegenden Simulationen liefern Aufspaltungsweiten von 40,3 Å, 41,0 Å und 41,8 Å für die Stufenversetzung, 13,4 Å, 15,0 Å, 16,9 Å, 18,8 Å, 20,7 Å und 22,6 Å für die Schraubenversetzung und als Stichprobe 33,6 Å für die 60°-Versetzung in der (111)-Ebene von kubisch-flächenzentriertem Kupfer. Diese liegen in guter Übereinstimmung mit den verfügbaren Meßwerten von 38 ± 6 Å [135], 18 ± 8 Å [135] und 34 ± 7 Å [136], insbesondere wenn man die dort einzeln gefundenen Aufspaltungsweiten ansieht [135][137]. Diese Übereinstimmung kann als Test für die atomistischen Potentiale aus Kapitel 2.2.1 gewertet werden. Insbesondere die Eigenschaften der Potentiale in der Nachbildung der elastischen Wechselwirkung und der Stapelfehlerenergie $\gamma^{\text{FS}} = 36 \frac{\text{J}}{\text{m}^2}$ werden damit bestätigt. Diese Eigenschaften können aufgrund der großen Aufspaltungsweiten und der geringen Überlappung der Kerne der Partialversetzungen separiert werden.

Die z.T. deutlichen Abweichungen zwischen den Werten dieser Arbeit sowie den Meßwerten und den Ergebnissen anderer Simulationen sind in der Wahl der atomistischen Potentiale begründet, welche an Stapelfehlerenergien von $30 \frac{\text{J}}{\text{m}^2}$ bis $70 \frac{\text{J}}{\text{m}^2}$ angepaßt sind. Daneben kann die Wahl der Randbedingungen der Simulationszelle [5][75] als auch durch die Wahl der Randbedingungen [119], Abbildung 2.7. Die in [93] diskutierte Abweichung der Kernweiten zwischen elastischer und atomistischer Rechnung in der Größe eines Faktors 2 kann in dieser Arbeit nicht bestätigt werden. Im Gegenteil sind die Unterschiede mit maximal 30% so gering, daß die Benutzung der anisotropen linearen Elastizitätstheorie in der Auswertung der Weak-Beam [135][137] bzw. HRTEM [136] Aufnahme als

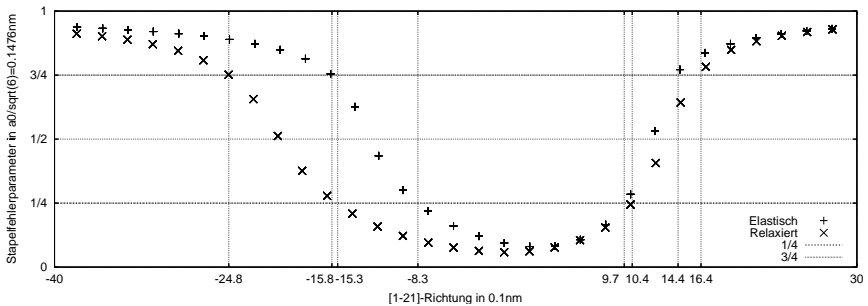


Abbildung 3.15: Stapelfehler Parameter γ_i aus 2.11 für gemischte Versetzung.

gerechtfertigt erscheint. Die großen Abweichungen in der Kernweiten anderer Simulationen lassen sich zum einen durch die Potentiale, zum anderen durch die Tatsache erklären, daß für Atomistik und Kontinuumslösung verschiedene Methoden zur Bestimmung der Kernweite herangezogen wurden. Eine bessere Auswertung und Anpassung an die Simulation wird erst möglich sein, wenn sowohl die Simulation der Versetzung als auch die der zugehörigen Elektronenstreuung als eine Ab-Initio-Simulation der atomaren Anordnung und elektronischen Dichten durchgeführt werden können.

Kapitel 4

Energiebarrieren der Versetzungsbewegung in reinem Kupfer

Im vorherigen Kapitel wurden die stabilen Lagen von unendlich langen geraden Versetzungen betrachtet. Zur Durchführung der zugehörigen Relaxationsrechnungen reicht es mit einem Iterationsverfahren und den flexiblen statischen Randbedingungen von Seite 22 die Beträge der auftretenden atomaren Kräfte auf Null, d.h. in der Praxis unter einen sehr geringen Schwellenwert, zu bringen. Um die Energiebarriere zwischen zwei stabilen Zuständen durch die Simulation zu erfassen und zu quantifizieren, gilt es drei Aufgabenstellungen zu lösen:

1. Auswahl geeigneter benachbarter Zustände aus den in Kapitel 3 berechneten Konfigurationen,
2. Anwendungen einer Methode aus 2.3.3 zur Bestimmung der Zwischenzustände und
3. Sinnvolle Maßfunktion für die Energie der Konfiguration.

Die vorgestellten Ergebnisse werden am Ende des Kapitels diskutiert.

4.1 Gespeicherte Energie einer Versetzung

Die Bestimmung der gespeicherten mechanischen Energie, d.h. des Energieanteils, der vollständig durch die interatomaren Potentialfunktionen berechnet wer-

den kann, ergibt sich für eine vorliegende Simulationszelle einfach aus der Summe 2.5 für alle Atome, die nicht in der Randzone liegen.

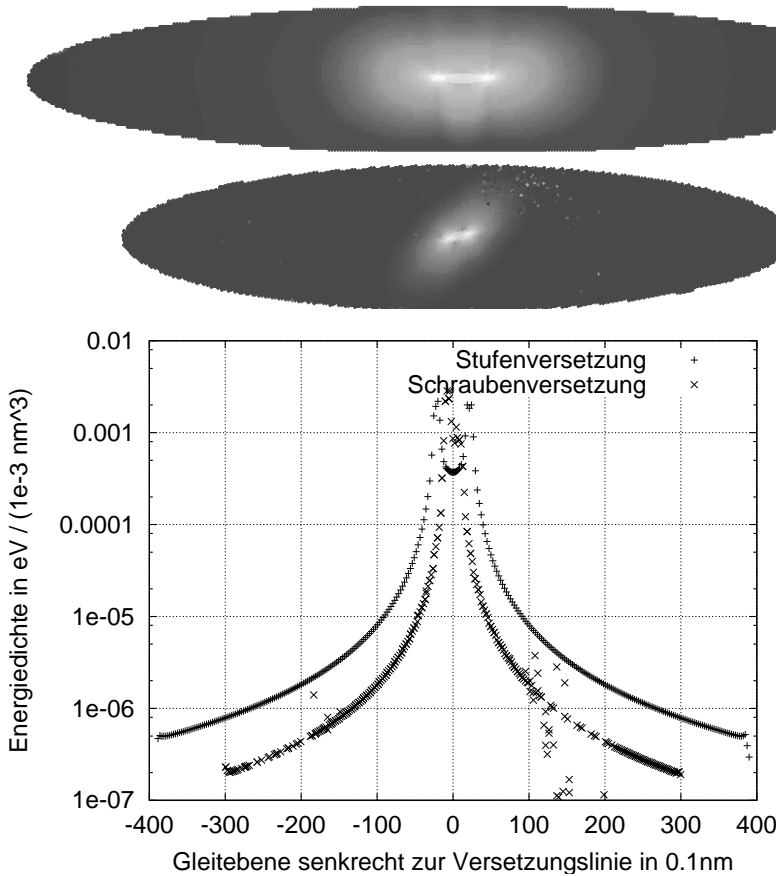


Abbildung 4.1: Energiedichteverteilung in der Ebene jeweils senkrecht zur Versetzungslinie für eine Stufenversetzung (a) und eine Schraubenversetzung (b), sowie deren Beträge nahe der (111)-Gleitebene.

Diese einfache Bestimmung ist, wie in Punkt 3 oben angedeutet, jedoch nicht notwendig eine Größe, die einen Vergleich zwischen verschiedenen Konfigurationen direkt ermöglicht. Da es sich bei einer Versetzung um einen Defekt mit langreichweitiger Wechselwirkung handelt, zeigt auch die Energiedichte (Abb. 4.1) in größerer Entfernung vom Versetzungskern noch deutliche Änderungen. Eine Integration bzw. Summation über diese Energieanteile ergibt eine Energie, welche von drei Parametern abhängig ist:

1. von der Größe der Simulationszelle,
2. von der Form der Simulationszelle und
3. von der Lage der Versetzung in dem simulierten Volumen.

Die Betrachtung der elastischen Lösung zeigt, daß die Energiedichte als Integrand in Gleichung A.11 mit dem Faktor $\frac{1}{r^2}$ für den Abstand r von der jeweiligen Partialversetzung abnimmt. Abbildung 4.1 zeigt ein vergleichbares Verhalten für die atomistische Simulation. In der Simulation ist die Energiedichte gleich der Energie des spezifischen Atoms dividiert durch das Volumen der zugehörigen Wigner-Seitz Zelle. Damit und mit den ebenfalls in 4.1 abgebildeten Mustern der Energiedichteverteilung sind die Punkte 1 und 2 direkt zu erschließen. In den Simulationen dieser Arbeit kamen ellipsoid und quaderförmige Geometrien zum Einsatz. Die Abhängigkeit von der Größe im atomistischen Fall als Ausschnitt eines größeren Simulationsvolumens in ellipsoidischer Geometrie aus Abb. 4.2 ist ähnlich der erwarteten logarithmischen der Elastizitätstheorie [1]. Wählt man also zwei Konfigurationen mit gleichem Volumen, so kann ein Vergleich der Energien, d.h. z.B. eine Differenzbildung aussagekräftig sein, da sich der für beide fehlende Energieanteil außerhalb des Volumens ebenso auslöscht, wie der für beide gleiche Anteil im Volumen. Reduziert man die Energie noch auf eine Energie pro Einheitslänge entlang der Versetzungslinie, so erhält man eine vergleichbare Größe. Eine Einschränkung zu dem beschriebenen Verfahren besteht, wenn die Lage der Versetzung innerhalb des Volumens variiert, wie es z.B. in Abb. 3.2 gezeigt wird. Dabei werden Teilvolumina mit höherer Energiedichte durch solche mit niedrigerer Energiedichte ersetzt, wie aus Abb. 4.1 ersichtlich ist. Eine elastische Abschätzung des Effekts erhält man, wenn man das Integral der Gesamtenergie aus Gleichung A.11 umschreibt. In die Koordinaten der Fläche $\mathcal{A} = \{x, y; \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} \leq 1\}$ (Abb. A.1) senkrecht zur Versetzungslinie projiziert ergeben sich die Koordinaten $\mathbf{r} = x\mathbf{m} + y\mathbf{n}$ wie in der Skizze 4.3 gezeigt. Die Lagen der Partialversetzungen sind damit $-\frac{d}{2} + l$ und $\frac{d}{2} + l$. Aus der Formel

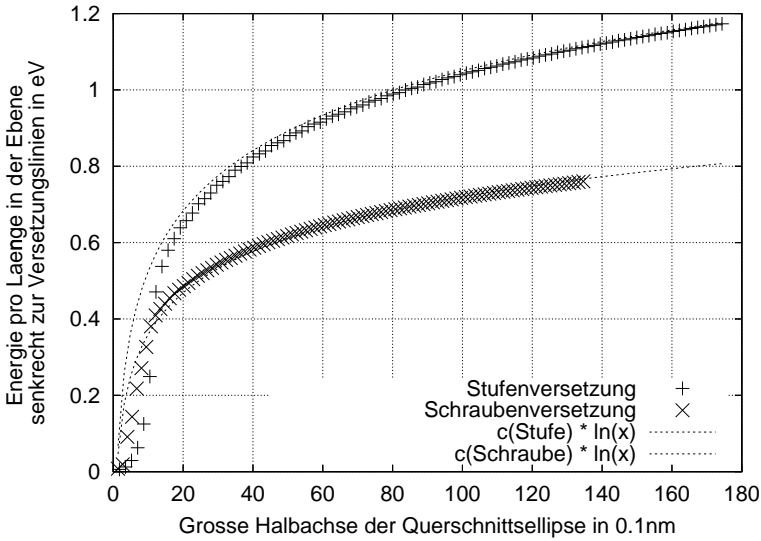


Abbildung 4.2: Energie von Stufen- bzw. Schraubenversetzung pro Länge in einer Ellipse senkrecht zur Versetzungslinie aufgetragen über der großen Halbachse der Ellipse. Das Verhältnis der Achsen beträgt 6 : 1 für die Stufen- bzw. 5 : 1 für die Schraubenversetzung.

der elastischen Energie der Versetzung (Gl. A.11) wird dann

$$\frac{E(l)}{L} = \sum_{i,j=1}^2 \sum_{\alpha,\beta=1}^6 \left(\underbrace{\frac{1}{4\pi^2} (\pm A_i^{(\alpha)}) (\pm A_j^{(\beta)}) (m_i + p^{(\alpha)} n_i) (m_j + p^{(\beta)} n_j)}_{B_{i,j}^{(\alpha,\beta)}} \right) \int_{\mathcal{A}} dS(x,y) \frac{1}{(x \pm \frac{d}{2} + l + p^{(\alpha)} y) (x \pm \frac{d}{2} + l + p^{(\beta)} y)} \quad (4.1)$$

Eine Reihenentwicklung in l , sowie die Symmetrieüberlegung, daß es aufgrund der identischen Energieänderung für die Richtungen $\pm l$ keine ungeraden Terme in l geben kann, führen auf

$$\frac{E(l)}{L} = \sum_{i,j=1}^2 \sum_{\alpha,\beta=1}^6 \left(B_{i,j}^{(\alpha,\beta)} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \int_{\mathcal{A}} dS(x,y) \left[\frac{((x \pm \frac{d}{2} + p^{(\alpha)} y) + (x \pm \frac{d}{2} + p^{(\beta)} y))^{2n}}{(x \pm \frac{d}{2} + p^{(\alpha)} y)^{2n} (x \pm \frac{d}{2} + p^{(\beta)} y)^{2n}} \right] l^{2n} \right) \quad (4.2)$$

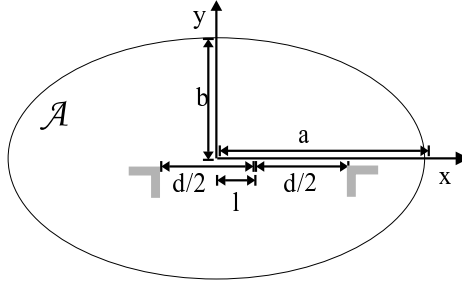


Abbildung 4.3: Ellipse senkrecht zur Versetzungslinie.

Da d und a in realistischen Rechnungen deutlich größer sind als l , sind die Terme für l^0 , l^2 und l^4 ausreichend für die Abschätzung des Effektes. Abbildung 4.4 zeigt auch für eine atomistische Rechnung eines Ausschnittes aus einem größeren Volumen dieselbe Abhängigkeit von der 2. und 4. Potenz von l . Die deutlich verschiedenen Energien der Parabeln sind durch die unterschiedlichen simulierten Volumina und die stärkeren Relaxationen der atomistischen Lösung zu erklären.

Neben den bisher beschriebenen Effekten kann die Energie auch von den verwendeten Randbedingungen abhängen. Im Fall freier oder statischer Randbedingungen ist dies offensichtlich. Durch die Mitführung der benutzten flexibel statischen Ränder wird die hiervon ausgehende Störung sehr klein und sorgt in erster Linie für eine Abweichung vom rein atomistischen aus Abb. 4.4 hin zum elastischen. Ist also für eine bestimmte Klasse von Konfigurationen bei gleichem Volumen und gleicher Atomzahl die Energie bekannt, so kann man mit dem obigen Ansatz eines Polynoms 4. Grades zur Korrektur die Aussagekraft der Simulation noch erhöhen. Dies zeigt Abbildung 4.5, welche zu den Fällen (i) und (ii) auf Seite 32 sowie (i) auf Seite 34 die zugeordneten Energien zeigt. Für die Stufenversetzung ergibt sich eine gute Übereinstimmung mit der Parabelform, für die Schraubenversetzung ist dies durch weniger Werte mit höheren Schwankungen nicht so gut. Die höheren Schwankungen resultieren aus der geringeren Iterationszahl. Insgesamt ist zu bemerken, daß die gefundenen Differenzen in der Größenordnung von $10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$ bei ca. 195000 Atomen mit je ca. 3,51 eV Bindungsenergie und einer Versetzungslänge von ca. 70 \AA eine Genauigkeit von $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-10}$ ergeben. Dies wird durch die hohe Iterationszahl, d.h. die Nähe zum asymptotisch erreichbaren kräftefreien Zustand, erreicht. Zur Auswertung und Interpretation der folgenden Ergebnisse, in denen Energiebarrieren in der Größenordnung $3 \cdot 10^{-5} - 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$ zu sehen sein werden, sind die gefundenen Korrekturparabeln derselben Konfigurationsschar einsetzbar. Weiterhin beziehen sich die unten angegebenen Zahlenwerte für Energien und deren Fehler

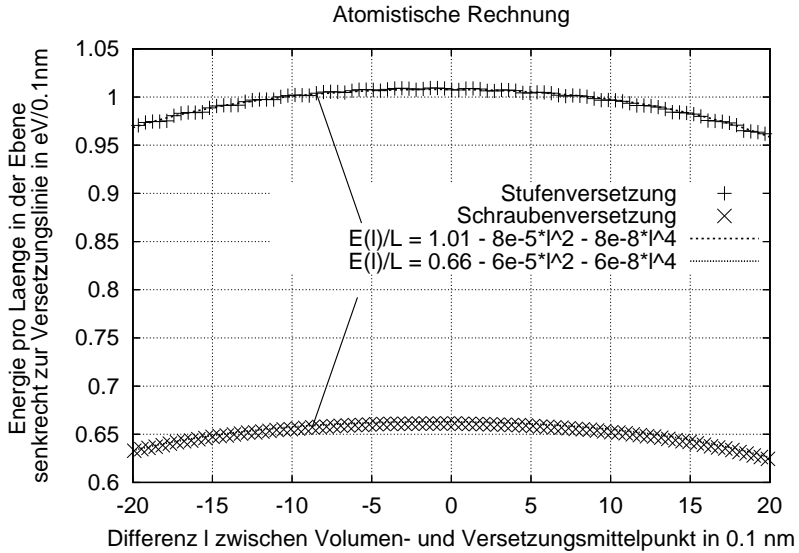
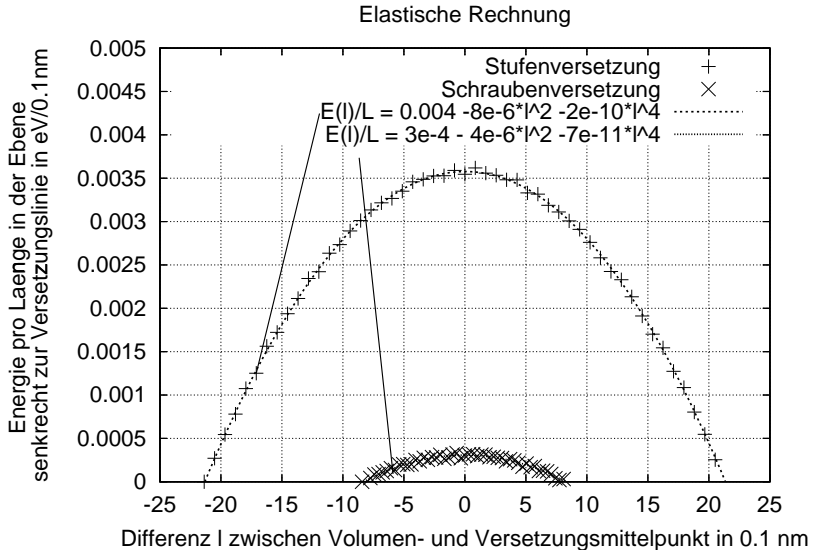


Abbildung 4.4: Energienvariationen für die Verschiebung des Versetzungsmittelpunktes relativ zum Simulationsvolumen im elastischen und im atomistischen Fall. Die Lage der jeweiligen Maxima ist simulationsbedingt.

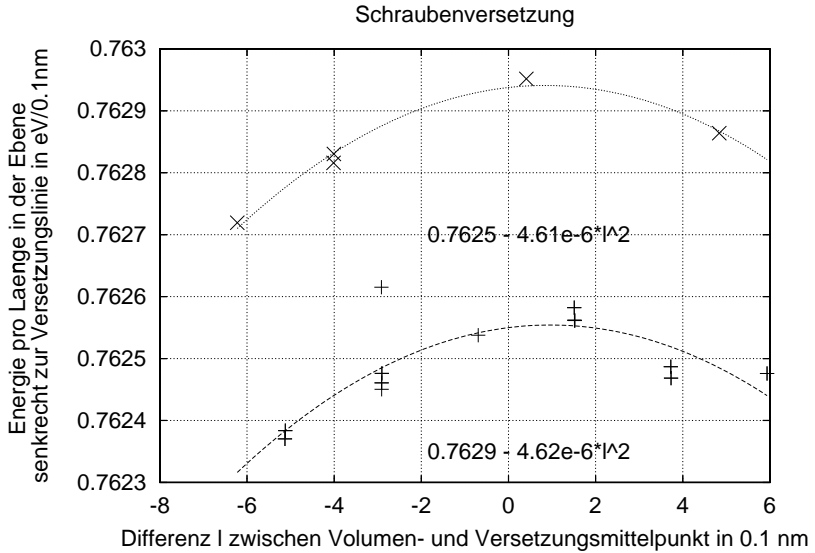
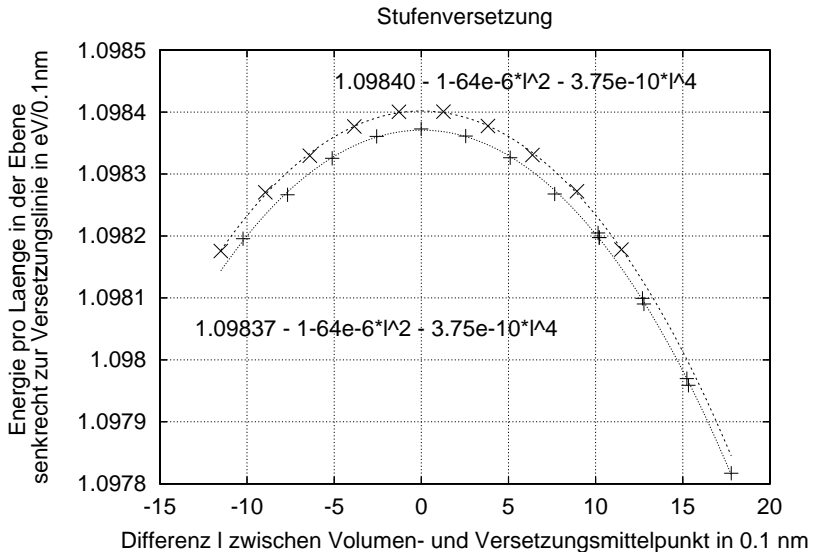


Abbildung 4.5: Energienvariationen für die Verschiebung des Versetzungsmittelpunktes relativ zum Simulationsvolumen im atomistischen Fall für Stufenversetzungen oben und Schraubenversetzungen unten.

auf das eingesetzte atomistische Potential 2.2.1, d.h. evtl. systematische Fehler, welche sich aus der Wahl des Potentials ergeben, sind nicht quantifiziert.

4.2 Energiebarrieren aus der atomistischen Rechnung

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse eines Großteils der Simulationsrechnungen vorgestellt. Neben den hier präsentierten Abbildungen und Daten gibt es zu den einzelnen Unterabschnitten jeweils Animationen der Versetzungskonfigurationen entlang der Sattelpunktspfade auf der beiliegenden CDROM, erreichbar über eine kurze Zusammenfassung dieses Kapitels. Anhand der vorliegenden Ergebnisse werden die Vor- und Nachteile der beiden in 2.3.3 vorgestellten Verfahren zur Bestimmung von Sattelpunkt und Minimalenergiepfad (MEP) bewertet.

Die zu erwartende Größe für die Energiebarriere ist eine Energie pro Länge $\frac{E}{L}$ der Versetzungslinie, angegeben in $\frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$, in Abhängigkeit eines Positionsparameters x (in \AA), der jeweils die relative Lage einer Partialversetzung $x_{1/2}$ oder des Mittelpunktes der gesamten Versetzung $x_0 = \frac{x_1+x_2}{2}$ in der Gleitebene und senkrecht zur Versetzungslinie angibt. Im Sinne einer Arbeitsfunktion einer quasistatischen Versetzungsbewegung entlang x ist $F(x) = \frac{1}{L} \frac{dE(x_i)}{dx_i}$ die Kraft auf die jeweils bewegte Versetzung. Die zugehörige kritische Spannung kann nicht aus Kraft und Ableitung bestimmt werden, da für die Ableitung die Kenntnis der Versetzungsdichte maßgeblich ist. Eine gute Abschätzung gibt jedoch die Auswertung der Peach-Koehler Kraft auf die Versetzung. Ist $\tau(x)$ die Spannungskomponente entlang x in der Gleitebene, so erhält man

$$\tau^{\text{kritisch}} = \max_x \left(\frac{1}{L} \frac{dE(x_i)}{dx_i} \cdot \frac{1}{|\mathbf{b}_i|} \right). \quad (4.3)$$

Alternativ ist eine direkte Ermittlung der kritischen Spannung in der Simulation denkbar, indem man dem Simulationsvolumen iterativ steigende Dehnungs- und damit Spannungszustände über die Randatome aufprägt. Die kritische Spannung ist an der Stelle zu verzeichnen, an der die folgende Iteration für die Versetzung eine deutliche Bewegung in mindestens der Größenordnung einer Gitterperiodizität, oft jedoch deutlich größer, in Bewegungsrichtung zeigt.

Eine Simulation dieser Art mit sehr feiner Schrittweite und hoher Anzahl von Relaxationsschritten pro Spannungsschritt für eine Stufenversetzung ist in Abb. 4.6 gezeigt. Zu beobachten ist eine hohe kritische reine Scherspannung von ca. 50 MPa.

Daneben zeigt die Auswertung der Simulationsdaten, daß die Aufspaltungsweite konstant bleibt. Durch die vollständig symmetrische Spannungsverteilung bleibt offensichtlich die mögliche und erwartete sequenzielle Bewegung der Partialversetzungen [53], d.h. unabhängige Bewegung zur Minimierung der Gesamtenergie der Versetzung, unberücksichtigt. Um den erst nach Erreichen der kritischen Spannung überschrittenen Sattelpunkt auflösen zu können, muß die Relaxation als Lösung der Bewegungsgleichung mit hoher Dämpfung realisiert werden. Diese Forderung ist jedoch komplementär zu einer endlichen Iterationszahl für Spannungen nahe der kritischen Spannung. Diese gravierenden Nachteile führten zur Wahl der Methoden aus 2.3.3. Diese stellen die Energie des Systems in den Vordergrund, die Spannung ist eine abgeleitete Größe.

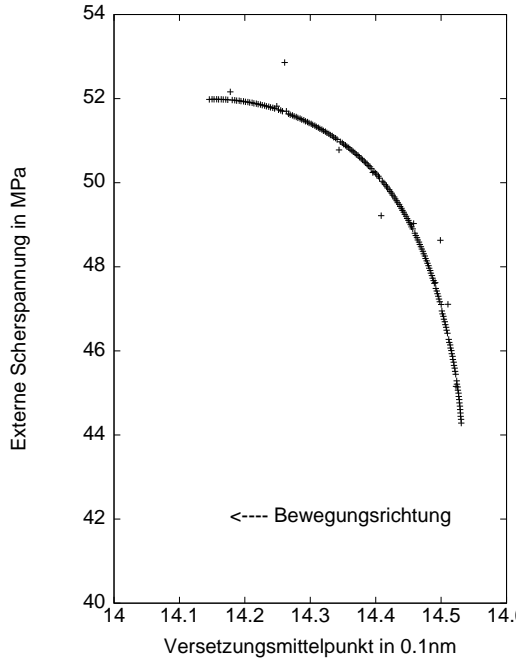


Abbildung 4.6: Kritische Scherspannung für eine Stufenversetzung bei iterativer Spannungserhöhung.

4.2.1 Stufenversetzung

Als Grundlage der folgenden Simulationen von Pfaden zwischen benachbarten stabilen Konfigurationen dienen die aus Abschnitt 3.1. Die dort vorgestellten Konfigurationen haben eine Versetzungslänge von $70,8 \text{ \AA}$ und ellipsoidische Geometrie mit je 239616 Atomen.

Einzelne Partialversetzung

Neben der Nachbildung physikalischer Fragestellungen eröffnet die Simulation die Möglichkeit, Probleme gemäß dem Ansatz eines Gedankenexperimentes in Teile zu separieren, die natürlich niemals beobachtbar wären. Um eine solche hypothetische, jedoch sehr hilfreiche Betrachtung handelt es sich bei der Simulation einer isolierten Partialversetzung. Die zugehörige zweite Partialversetzung wurde

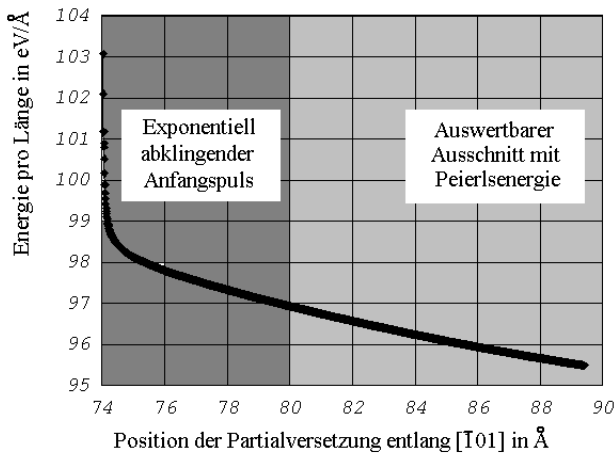


Abbildung 4.7: Potentielle Energie bei der Simulation der gedämpften Bewegung einer einzelnen Partialversetzung.

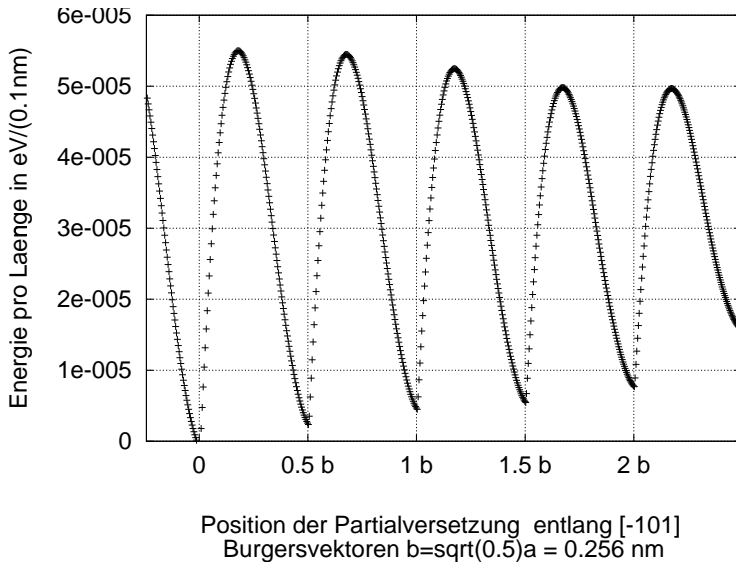


Abbildung 4.8: Variation der potentiellen Energie pro Versetzungslänge bei Translation einer Stufenpartialversetzung in der (111)-Gleitebene.

durch den elastizitätstheoretischen Ansatz außerhalb des Simulationsvolumens festgehalten. Bei der vorgegebenen Aufspaltungsweite von $d_0 \approx 360|\mathbf{b}_0|$ ist die elastische Wechselwirkung, welche mit dem Faktor $\frac{1}{d_0}$ skaliert, vernachlässigbar. Die einzige treibende Kraft für die Partialversetzung resultiert aus der Stapelfehlerenergie γ^{FS} (S. 30). Für die partielle Stufenversetzung mit Burgersvektor $\mathbf{b}_1 = \frac{a_0}{6}[\bar{1}\bar{1}2]$ entspricht die Stapelfehlerenergie nach 4.3 einer Spannung in der Gleitebene von $\tau^\gamma = 243\text{MPa}$. Der großen Menge an freiwerdender Versetzungsenergie im Kernbereich steht eine große Dämpfung gegenüber, so daß nach kurzer Einklingphase (Abb. 4.7) die Temperatur der wärmeren Atome im Versetzungskern in der Größenordnung $T^{\text{Kern}} < 30\text{mK}$ ist.

Bereinigt man den zweiten Teil der Energiekurve aus Abbildung 4.7 um den linearen Anteil der Stapelfehlerenergie und den parabolischen Anteil 2. und 4. Ordnung aus 4.1 so behält man die reine Variation der im atomaren Potential gespeicherten Energie pro Länge bei Translation der Partialversetzung in der Gleitebene (Abb. 4.8). Man erkennt eine Abnahme der Amplitude der Energievariation mit zunehmendem x , d.h. mit zunehmender Schrittzahl der Simulation. Zurückzuführen ist diese Abnahme auf den exponentiell abklingenden Energieanteil der unrelaxierten Startkonfiguration durch die Verwendung der überdämpften Bewegungsgleichung. Eine Korrektur auf eine asymptotisch zu erreichende Endamplitude ist aufgrund der wenigen Werte mit großer Unsicherheit behaftet und unterbleibt aus diesem Grund. Der kleinste Abstand von Minimum und Maximum liefert mit $4,2 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$ eine obere Abschätzung für die Energiebarriere der einzelnen Partialversetzung. Die auftretende Variation der Energie ist periodisch mit der Komponente des Burgersvektors \mathbf{b}_1 entlang der Bewegungsrichtung x . Abbildung 4.9 zeigt die zugehörigen Atomkonfigurationen im Versetzungskern. Die Maxima korrespondieren mit den auf Seite 32 gezeigten stabilen Lagen. Energetisch sind die beiden im Wechsel auftretenden Lagen, die mit symmetrisch eingeschobener Halbebene auftreten, nicht zu unterscheiden.

Die Ableitung der Energiekurve aus Abbildung 4.8 zeigt Abbildung 4.10. Damit läßt sich die kritische Spannung zur Überwindung der Energiebarriere mit 4.3 abschätzen durch

$$\tau_{\text{Partielle Stufe}}^{\text{kritisch}} < 25\text{MPa} . \quad (4.4)$$

Elementare Übergänge mit der Nudged-Elastic-Band Methode für aufgespaltene Stufenversetzungen

Simulationen des MEP mit der Nudged-Elastic-Band Methode haben den Vorteil, daß sie wesentlich genauer sind als die im vorherigen und nächsten Abschnitt präsentierte quasistatische Bewegungssimulation. Die Genauigkeit gründet auf dem Fehlen jeglicher kinetischer Energieanteile und der hohen Iterationszahl

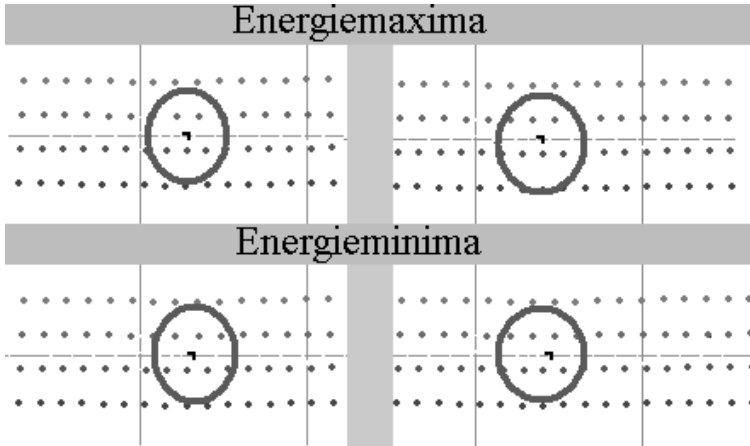


Abbildung 4.9: Atomkonfigurationen für Maxima und Minima aus Abbildung 4.8

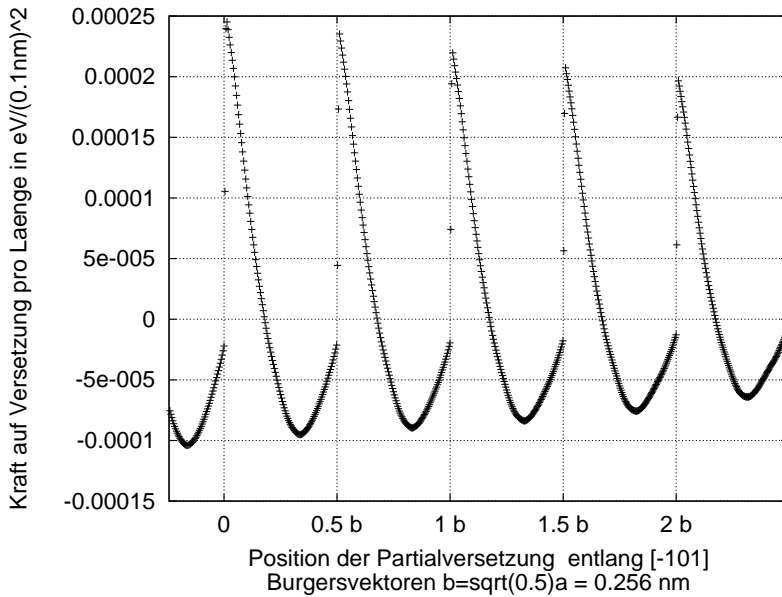


Abbildung 4.10: Variation der Kraft auf die Versetzung pro Versetzungslänge bei Translation einer Stufenpartialversetzung in der (111)-Gleitebene.

von mehr als 10000. Nachteilig ist, daß man nur einen ausgewählten Übergang untersuchen kann. Dieser Nachteil wird jedoch durch eine gute Vorauswahl, wie sie die systematisch angelegten Simulationen in Kapitel 3 darstellen, kompensiert. Ausgewählt wurden vier benachbarte Konfigurationen. Zur Erreichung des Energieprofils der einzelnen Pfade wurden diese getrennt mit fest vorgegebenen Randkonfigurationen gemäß der **Nudged-Elastic-Band** Methode (Seite 26) ermittelt. Die Kombination verschiedener Übergänge spiegelt die möglichen Einzelschritte der Partialversetzungen wider (Abb. 4.11). Die gezeigten Kombinationen, dargestellt durch die geraden Linien in Abb.4.11, sind als solche stabil und zeigen damit, daß zwischen den Pfaden, d.h. innerhalb der beiden eingeschlossenen Dreiecke in Abb. 4.11, Energiemaxima liegen müssen.

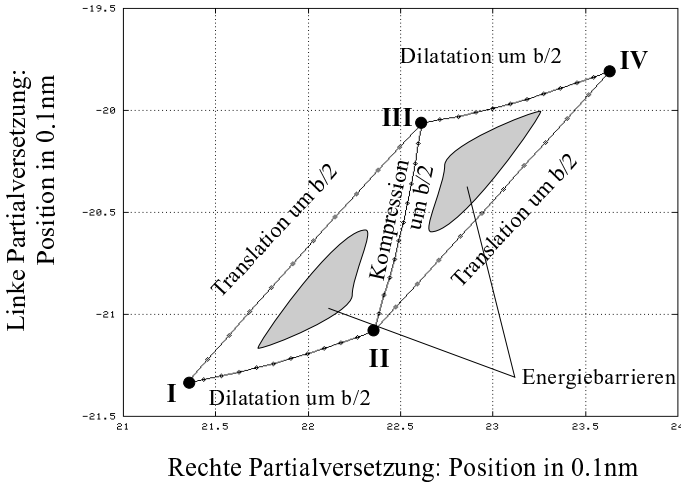


Abbildung 4.11: Kombinationen von Aufspaltungsweiten und Lagen der Partialversetzungen

Deutlicher zeigt sich diese Tatsache in den Abbildungen 4.12 und 4.13. Es fällt auf, daß die beiden benachbarten Konfigurationen gleicher Aufspaltungsweite mit symmetrisch eingefügter Halbebene wiederum energetisch gleichwertig sind. Die ganze Stärke der NEB Methode erweist sich im folgenden. Die je zwei Pfade der sequentiellen Translation der Partialversetzungen, d.h. $\overline{\text{I} - \text{III}} + \overline{\text{III} - \text{II}}$ und $\overline{\text{III} - \text{II}} + \overline{\text{II} - \text{IV}}$, werden zu je einem Pfad zusammengefaßt und einer erneuten Rechnung unterworfen. Die vorher festen Endpunkte **III** und **II** sind frei relaxierbare Simulationzellen in der Mitte des neuen Pfades geworden. Neben einem weiteren deutlichen Relaxationspotential hin zu niedrigeren Energien,

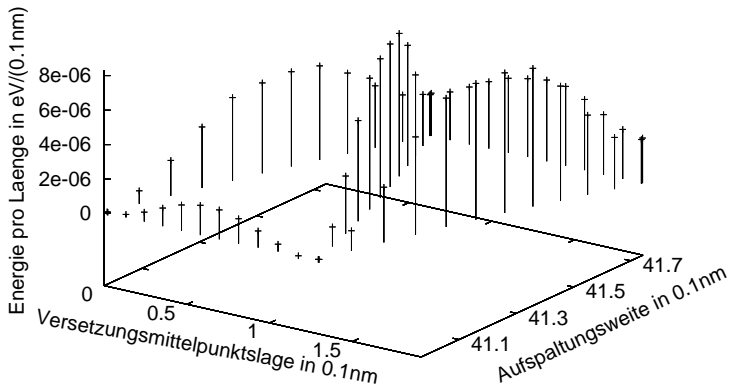


Abbildung 4.12: Kombinationen aus Abbildung 4.11 mit den Energieprofilen der Pfade

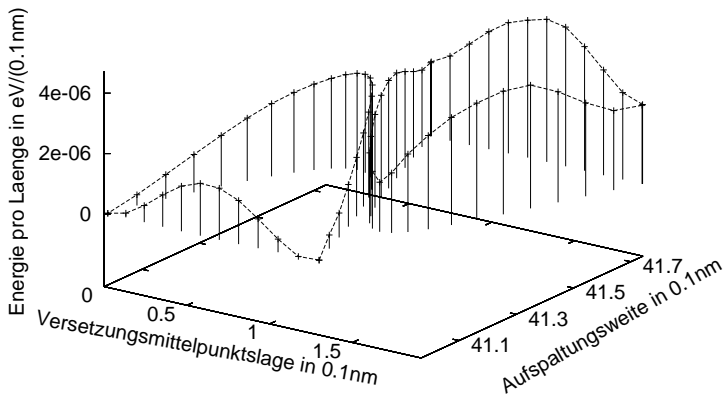


Abbildung 4.13: Energieprofile der zusammengelegten Pfade

welches den hohen Rechenaufwand rechtfertigt, erkennt man, daß diese Pfade sich nicht mehr an den lokalen Minima der vorher festen Endpunkte orientieren, sondern den günstigsten Pfad entlang der Flanke der zweidimensionalen Energiebarriere erreichen (Abb.4.13). Die Höhen der Energiebarrieren sind mit ca. $(3 \pm 1) \cdot 10^{-6} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$ in derselben Größenordnung, wie der Energiebeitrag durch Erhöhung der Aufspaltungsweite. Im Fall **I – III – II** wird eine Versetzung mit der Aufspaltungsweite $d = 41,0 \text{ \AA}$ direkt, d.h. **I – II**, sowie über die Aufweitung auf $d = 41,7 \text{ \AA}$, d.h. **I – III – II**, bewegt, wobei der zweite Pfad eine doppelt so große Sattelpunktenergie hat. Der direkt Pfad sollte als gegenüber jenem mit der Aufweitung bevorzugt werden. Anders ist der Fall **III – II – IV** in Abbildung 4.14 bei einer Ausgangsaufspaltungsweite von $d = 41,7 \text{ \AA}$.

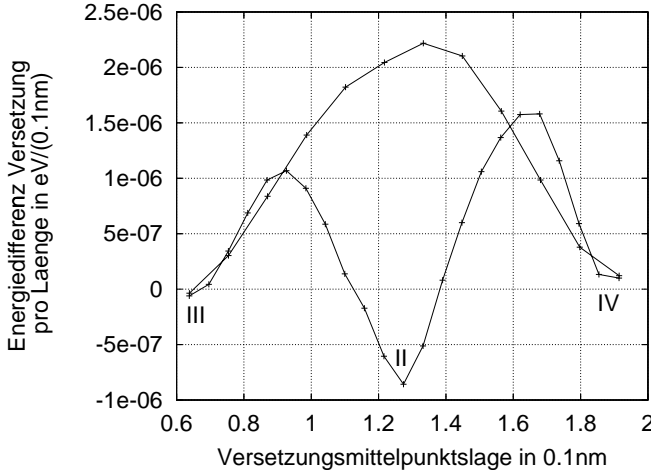


Abbildung 4.14: Pfad für Stufenversetzung mit $d = 41,7 \text{ \AA}$.

In Abbildung 4.14 ist eine Halbierung der Sattelpunktenergie für den indirekten Pfad **III – II – IV** gegenüber dem direkten Pfad **III – IV** zu beobachten. Die Partialversetzungen führen eine korrelierte asynchrone Bewegung aus, indem erst die linke und dann die rechte zur Translation der Gesamtversetzung beitragen. Betrachtet man die zugehörigen Kräfte auf die Versetzung, d.h. die maximalen Steigungen der Energiebarrieren, so erhält man ein umgekehrtes Ergebnis. Als Differentiationsvariable wird die Mittelpunktslage der Versetzung verwandt, da eine getrennte Differentiation nach den Einzelkoordinaten der Partialversetzungen bei der Berechnung der kritischen Spannung in der Gleitebene durch den jeweils kleineren Burgersvektorbetrag ausgeglichen wird. Es gilt für

die resultierenden kritischen Spannungen

$$\tau_{\text{Asynchron}}^{\text{kritisch}} \approx 2 \cdot \tau_{\text{Synchron}}^{\text{kritisch}} \approx 0,95 \pm 0,02 \text{MPa} . \quad (4.5)$$

Insgesamt gilt für alle in Abbildung 4.13 auftretenden Pfade, daß die kritischen Spannungen

$$\tau_{\text{Stufe}}^{\text{kritisch}} < 1 \text{MPa} \quad (4.6)$$

sind.

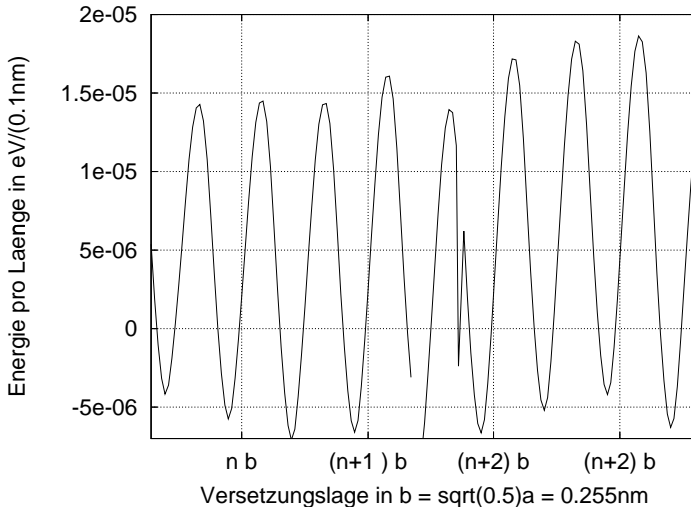


Abbildung 4.15: Energievariation bei quasistatischer Bewegung einer Stufenversetzung

Quasistatische Bewegung einer geraden Stufenversetzung

Für eine Stufenversetzung mit der Anfangsaufspaltungsweite von $d = 41,7 \text{ \AA}$ wurde eine quasistatische Bewegung simuliert, indem für eine überdämpfte Bewegung eine externe Spannung von 200MPa als $[100]$ -Zug angelegt wurde. Im Laufe der Simulation wird die Stufenversetzung auf den Wert von $d = 40,5 \text{ \AA}$ komprimiert. Dabei fluktuiert die Aufspaltungsweite mit dem Betrag von $\pm 0,04 \text{ \AA}$ um den fallenden Mittelwert (Abb. 4.17). Eine detaillierte Untersuchung ergab, daß innerhalb der möglichen Auflösung für die hier 71 \AA lange Versetzung kein Kinkpaarmechanismus zu erkennen war, obwohl man diesen mit einer sehr

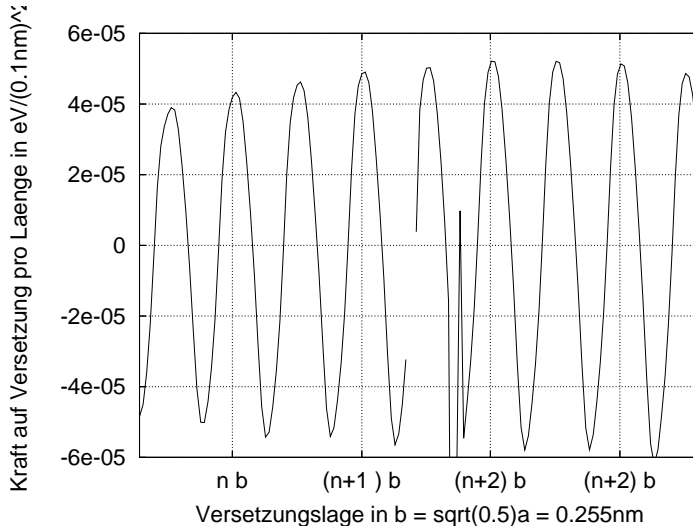


Abbildung 4.16: Potentialkräfte auf die Stufenversetzung bei quasistatischer Bewegung

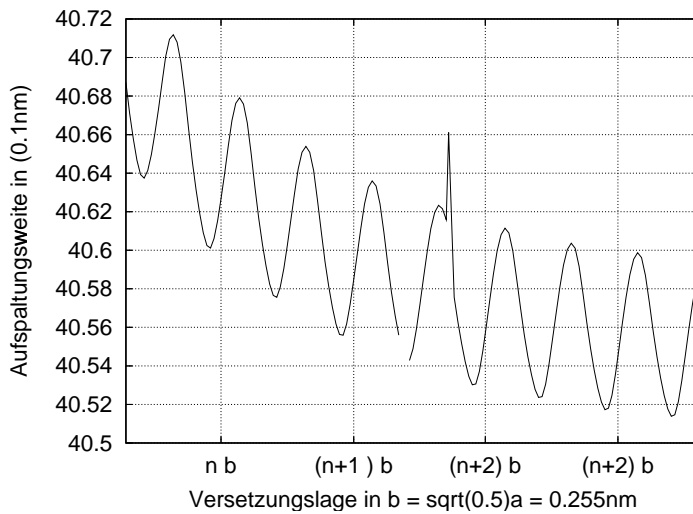


Abbildung 4.17: Aufspaltungsweite der Stufenversetzung bei quasistatischer Bewegung

flachen und langen Kinke hinter dem gitterperiodischen Verhalten der Aufspaltungsweite vermuten muß. Zusammen mit dieser Fluktuation in d findet man nach einer Datenanalyse ähnlich der auf Seite 53 die in Abbildung 4.15 gezeigte Energiebarriere von $2 - 2.5 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$, welche in der Größenordnung zwischen den Ergebnissen der einzelnen Partialversetzung und denen der NEB Methode liegt. Die geringe Restdynamik der Simulationsmethode ist in den schwankenden Maxima und Minima wiederzuerkennen. Die in den drei Abbildungen auftauchende Unstetigkeit bei $(n + \frac{3}{4})b$ hat numerische Ursachen durch eine Unterbrechung der Simulationsrechnung. Die zugehörige kritische Spannung ist nach Abbildung 4.16

$$\tau_{\text{Stufe quasistatisch}}^{\text{kritisch}} \approx 3 \pm 0,1 \text{MPa}. \quad (4.7)$$

4.2.2 Schraubenversetzung

Einzelne Partialversetzung

Analog zur Vorgehensweise für die Stufenversetzung wurde die Energiebarriere und kritische Spannung für eine freie Schraubenpartialversetzung mit der überdämpften Simulationsmethode bestimmt. Die Variationen treten ebenfalls mit der in Kapitel 3 gefundenen Periodizität des Gitters von $\sqrt{\frac{3}{8}}a_0$ auf. Die zugehörige Energiebarriere ergibt sich aus Abbildung 4.18 mit $(5 \pm 1) \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$ trotz besserer Korrektur für den exponentiell dämpfenden Term, der hier aus der kinetischen Restenergie bestimmt werden konnte, um den Faktor 10 höher als jener der Stufenpartialversetzung. Die kritische Spannung in der Gleitebene zeigt mit

$$\tau_{\text{Partielle Schraube}}^{\text{kritisch}} \approx 55 \pm 5 \text{MPa} \quad (4.8)$$

mehr als den doppelten Wert der Stufenversetzung.

Elementare Übergänge mit der Nudged-Elastic-Band Methode für aufgespaltene Schraubenversetzungen

Für die NEB Methode wurden drei Konfigurationen im Bereich von $d = 16,8 \text{\AA}$ und $18,8 \text{\AA}$ ausgewählt. Gezeigt sind diese Übergänge in Abbildung 4.20. Die Energieverläufe der direkten Übergänge sind in Abbildung 4.21 zusammengestellt. Diese Übergänge haben als Endpunkte jeweils lokale Minima, d.h. stabile Konfigurationen. Die Energiebarriere des reinen Translationsübergangs ist mit dem großen Wert von $(2,5 \pm 0,05) \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$ ca. 8-mal so groß wie der zugehörige Wert für die Stufenversetzung. Wählt man die Kombination aus Dilatations-

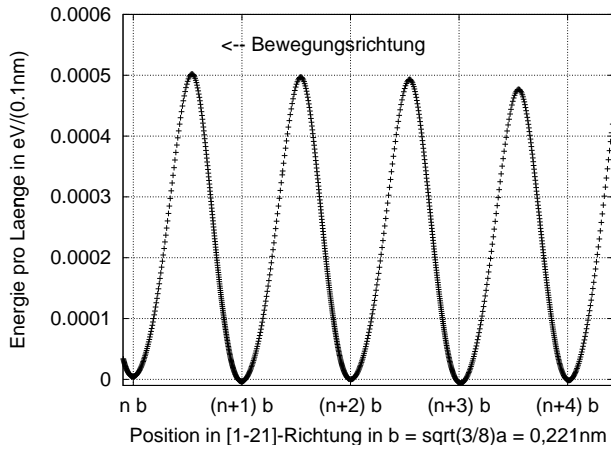


Abbildung 4.18: Energievariation für freie gedämpfte Bewegung einer Schraubenpartialversetzung.

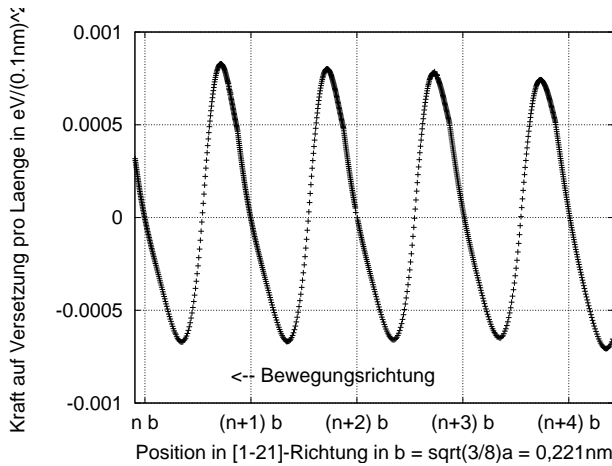


Abbildung 4.19: Kräfte auf eine Schraubenpartialversetzung für freie gedämpfte Bewegung.

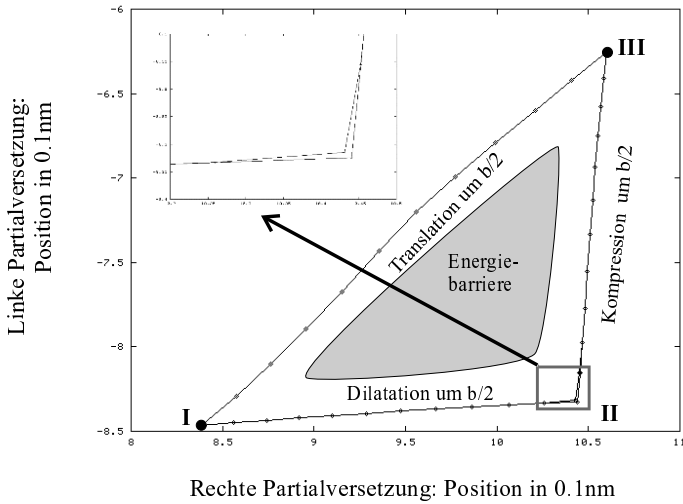


Abbildung 4.20: Kombinationen von Schraubenversetzungsconfigurationen.

Energie pro Laenge in eV/(0.1nm)

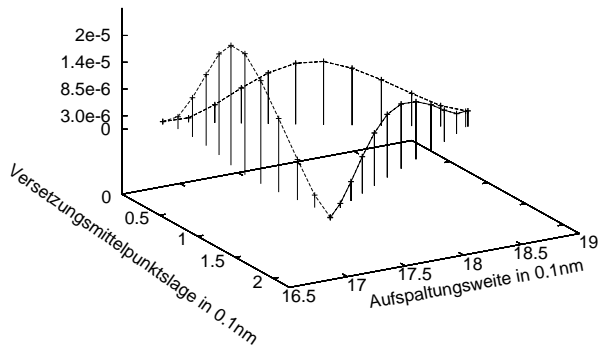


Abbildung 4.21: Vier mögliche **Minimal-Energie-Pfade** für eine aufgespaltenen Schraubenversetzung.

und Kompressionspfad so sinkt die zu überwindende Energiebarriere auf ca. die Hälfte mit $(1,3 \pm 0,05) \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$. Bei der Betrachtung der Kräfte, d.h. der Steigung der Energiebarrieren aufgetragen über der Lage des Versetzungsmittelpunktes, und der zugehörigen kritischen Spannungen in der Gleitebene, so kehren sich die Verhältnisse um.

$$\tau_{\text{Asynchron}}^{\text{kritisch}} \approx 1,1 \cdot \tau_{\text{Synchron}}^{\text{kritisch}} \approx 2,5 \pm 0,1 \text{ MPa} . \quad (4.9)$$

Nimmt man die Kombination aus Dilations- und Kompressionspfad zusammen und läßt sie als ganzen Pfad durch die NEB Methode relaxieren, so findet man, anders als bei der Stufenversetzung keine wesentliche Abweichung vom ursprünglichen Pfad. Die geringe Abweichung ist in der Ausschnittvergrößerung in Abb. 4.20 gezeigt. Der Einfluß auf die Energie des Zustandes ist so gering, daß er in Abbildung 4.21 nicht aufgelöst werden kann.

Quasistatische Bewegung einer geraden Schraubenversetzung

Zur Modellierung der quasistatischen Bewegung wurde eine Simulationszelle gleicher Geometrie wie in den vorherigen Kapiteln angenommen, deren periodische Achse entlang der Versetzungslinie verdreifacht wurde. Damit wurde eine Versetzungslänge von 214,7 \AA erreicht.

Abbildung 4.22 zeigt, daß die Energie korreliert mit der Aufspaltungsweite (Abb. 4.23) eine starke periodische Schwankung aufweist. Die innere Struktur der Energiefunktion zeigt die jeweils größere Aufspaltungsweite. Die Energiebarriere liegt bei $(4 \pm 0,1 \text{ bzw. } 5 \pm 0,1) \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$. In Abb. 4.24 sieht man die Bewegung der rechten Partialversetzung. Diese findet im Wechsel so auch für die linke Partialversetzung statt. Bei der Überwindung der Potentialbarriere erkennt man eine kleine Ausbauchung der Versetzung von maximal 0,3 \AA , die sich über die volle Versetzungslänge erstreckt. Die kritische Spannung unter denen die Bewegung stattfinden würde, ist

$$\tau_{\text{Schraube/Zug}}^{\text{kritisch}} \approx 82 \pm 5 \text{ MPa} . \quad (4.10)$$

Bei zusätzlichen Simulationen von Konfigurationen mit Versetzungslängen von 20,5 \AA und 71,6 \AA ergab sich, daß die Bewegung immer mit der Variation der Aufspaltungsweite zwischen 14,7 \AA und 16,2 \AA voranschreitet, unabhängig von der Länge der Versetzung. Dies galt auch, wenn die Startaufspaltungsweite geringer als 14,7 \AA gewählt wurde. Setzt man die Simulationszelle unter Druck indem man das Vorzeichen der externen Spannung ändert, so erhält man einen umgekehrten Effekt. Die Aufspaltungsweite steigt zuerst auf 21,8 \AA bzw. auf

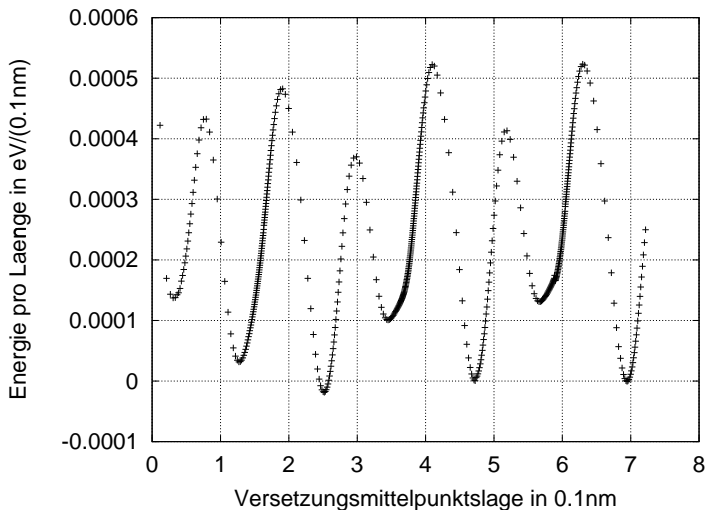


Abbildung 4.22: Energievariation für freie gedämpfte Bewegung einer Schraubenversetzung unter 300 MPa [100]-Zug.

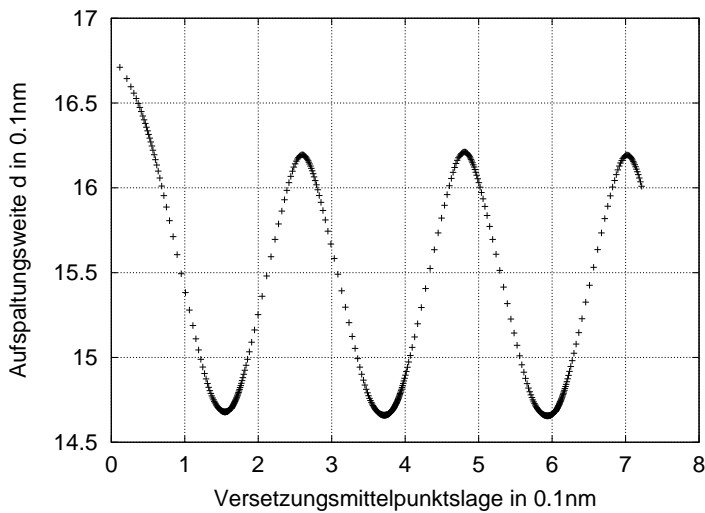


Abbildung 4.23: Variation der Aufspaltungsweite für freie gedämpfte Bewegung einer Schraubenversetzung unter 300 MPa [100]-Zug.

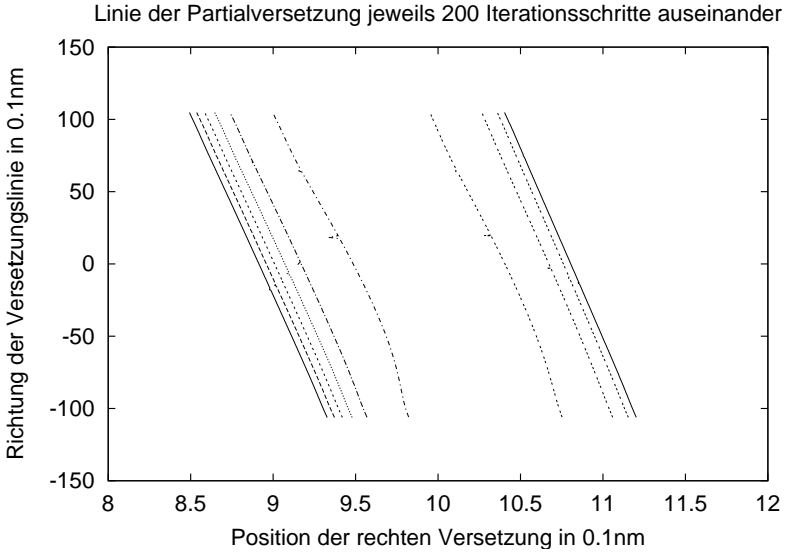


Abbildung 4.24: Bewegung der rechten Schraubenpartialversetzung unter ange- deuteter Kinkbildung.

23,3 Å (Abb. 4.26), bevor die Versetzung anfängt sich fortzubewegen. Die Ener- giebarriere (Abb. 4.25) gleicht mit $5,5 \pm 0,5 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{Å}}$ bei einer Versetzungslänge von 71,6 Å dem Wert für den uniaxialen Zug. Mit

$$\tau_{\text{Schraube/Druck}}^{\text{kritisch}} \approx 85 \pm 5 \text{ MPa}. \quad (4.11)$$

ist die kritische Spannung mit jener der Simulation des Zugexperimentes iden- tisch, jedoch wurde mit 500 MPa eine deutlich höhere externe Spannung zur Versetzungsbewegung benötigt.

Die kritische Spannung der Versetzungsbewegung nimmt mit zunehmender Länge L und damit abnehmender Steifigkeit der Versetzung ab. Eine lineare Ex- trapolation der gefundenen Werte hin zur Größenordnung von 1 MPa ergibt

$\tau_{\text{Schraube}}^{\text{kritisch}}$	$110 \pm 5 \text{ MPa}$	$90 \pm 5 \text{ MPa}$	$82 \pm 5 \text{ MPa}$	\rightarrow	$\approx 1 \text{ MPa}$
L	$20,5 \text{ Å}$	$71,6 \text{ Å}$	$214,7 \text{ Å}$	$\parallel \rightarrow$	$\approx 850 \pm 100 \text{ Å}$

Eine andere Extrapolation wäre eventuell dem Kinkpaarmodell angemessener, die Anzahl von nur drei Datenpunkten läßt jedoch nur diese sehr grobe Abschätzung zu.

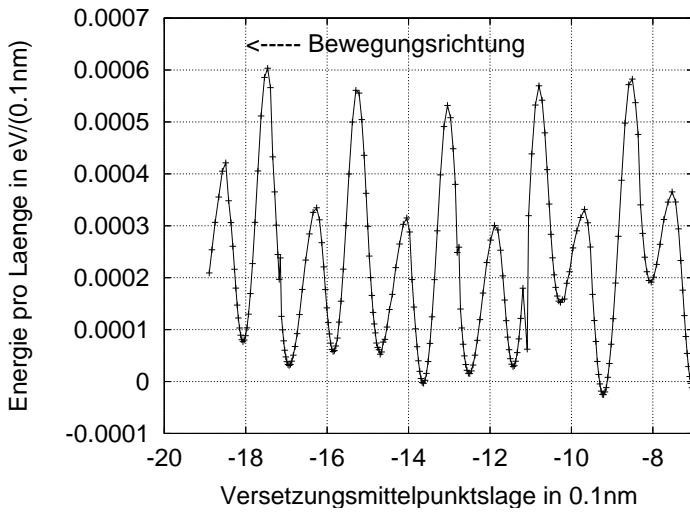


Abbildung 4.25: Energievariation für freie gedämpfte Bewegung einer Schraubenversetzung unter 500 MPa [100]-Druck.

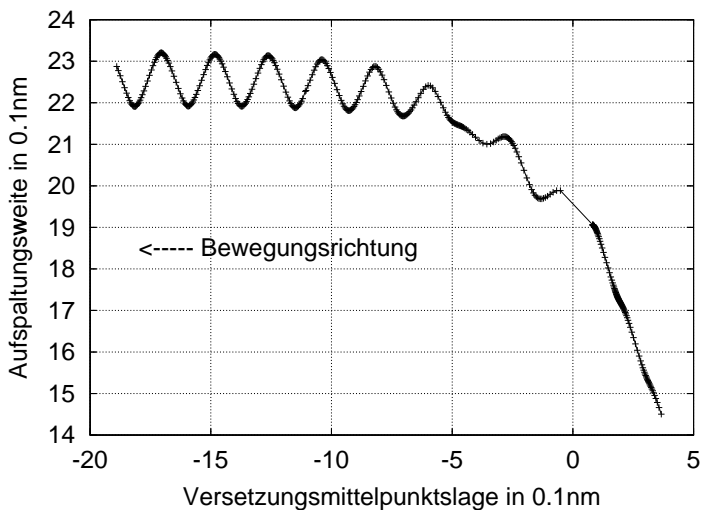


Abbildung 4.26: Variation der Aufspaltungsweite für freie gedämpfte Bewegung einer Schraubenversetzung unter 500 MPa [100]-Druck.

4.2.3 Diskussion der Ergebnisse

Nimmt man die gefundenen Übergänge der geraden Versetzungen zwischen benachbarten vollständig relaxierten Zuständen, so kann man die gefundenen Werte auf folgende Weisen mit dem Experiment vergleichen. Unter der Annahme, daß im natürlichen Kupfereinkristall die Versetzungen i.a. weder gerade sind, noch im vollständig spannungsfreien Fall existieren, kann man die vorgestellten Idealfälle als vernünftigen Mittelwert über alle Versetzungen ansehen, die durch Spannungsgradienten in ihrer Mobilität sowohl gefördert, als auch behindert sein können. Die errechneten kritischen Spannungen, die äquivalent sind zu den oft zitierten Peierlsspannungen des Peierls-Nabarro Modells, müssen also von der Größenordnung der experimentellen Spannungen sein, unter denen die Bewegung einer größeren Anzahl von Versetzungen bei geringen Temperaturen einsetzt.

In der Literatur finden sich die folgenden experimentellen Werte

- aus der Extrapolation von Streckgrenzenmessungen, d.h. kritische Schub- und Scherspannungen: 0,29 MPa und 0,57 MPa (zusammengestellt in [46];
- aus Messung der kritischen Schub- und Scherspannungen bei niedrigen Temperaturen: 0,82 MPa [138] und 0,27 MPa [40];
- aus Auswertung von Messungen des Bordoni Peaks: 30 MPa [139].
- sowie aus den kleinsten auftretenden Spannungen bei Messungen von Versetzungsgeschwindigkeiten durch Ätzgrübchen: 0,002–0,06 MPa [140] und 0,4 MPa [141].

Die bisherige Simulationspraxis nach dem Prinzip von Seite 50 ist nicht in der Lage diese Größen zu reproduzieren. In den vorliegenden Simulationen zeigen sich auf den ersten Blick deutliche Unterschiede zwischen Stufen- und Schraubenversetzungen.

Stufenversetzung Für die aufgespaltene Stufenversetzung konnten die kritischen Spannungen der Messungen insbesondere mit der NEB Methode in guter Näherung reproduziert werden. Die quasistatische Simulation zeigt darüber hinaus, daß im Fall der rein spannungsgetriebenen Versetzungsbewegung für tiefe Temperaturen der Pfad der kleinsten kritischen Spannung dem der kleinsten Energiebarriere vorgezogen wird. Die geringe aber deutlich reproduzierbare Schwankung der Aufspaltungsweite im quasistatischen Fall (Abb. 4.17) sowie das Abschneiden der stabilen Lagen in der Simulation des Gesamtpfades in der NEB Betrachtung auf Seite 55 deuten auf eine flache Anordnung der Energiebarriere als Funktion der Lagen beider Partialversetzungen an, so daß wie beobachtet

Kinkpaarbildung nahezu ausgeschlossen ist. Da in den vorliegenden Simulationen aufgrund der Rechenzeitbeschränkung keine Konvergenz, nur asymptotisches Verhalten erzielt werden konnte, kann man davon ausgehen, daß das volle Potential der vorgestellten Methoden noch nicht ausgeschöpft ist.

Schraubenversetzung Für die Schraubenversetzung zeigt sich ein differenzierteres Bild. Während die NEB Methode für den betrachteten Fall kritische Spannungen vorhersagt, die zumindest in die Größenordnung der Messungen reichen, so zeigt die quasistatische Rechnung ein vollständig anderes Verhalten. Die quasistatischen Simulationen benötigen Zugspannungen von einigen hundert MPa, damit sich die Versetzung überhaupt bewegt. Gleichzeitig scheint sich zunächst eine spezielle Kombination von Aufspaltungsweiten einzustellen, zwischen denen im Weiteren die bewegte Versetzung wechselt. Daneben deutet der Wechsel zwischen Bewegung im ausgebogenen Zustand und Ruhen der Partialversetzungen im geraden Zustand auf einen von den Partialversetzungen im Wechsel ausgeführten Kinkpaarmechanismus hin. Dies paßt mit der Beobachtung aus Abbildung 4.20 zusammen, in der die zu vernachlässigende Relaxation des Gesamtpfades auf eine Energiebarriere mit steilen Flanken hinweist. Eine einfache Berechnung der Peach-Köhler Kraft $\frac{\mathbf{F}}{L}$ [1] auf die einzelnen Partialversetzungen für den vorliegenden uniaxialen Zug σ^{extern} entlang [100] nach

$$\frac{\mathbf{F}_i}{L} = (b_i \cdot \sigma^{\text{extern}}) \times \xi \quad (4.12)$$

zeigt, daß die Kraftkomponente in der Gleitebene, senkrecht zur Versetzungslinie ξ unterschiedlich ist für die beiden Partialversetzungen. Sowohl für die Stufen-, als auch für die Schraubenversetzung ergibt sich

$$\frac{F_1}{L} = \frac{a_0 \sigma^{\text{extern}}}{12\sqrt{3}} \quad (4.13)$$

$$\frac{F_2}{L} = \frac{a_0 \sigma^{\text{extern}}}{6\sqrt{3}}. \quad (4.14)$$

Für die flache Energiebarriere der Stufenversetzung bedeutet der Faktor 2 in der Kraft auf die Versetzung, daß sich die Versetzung bewegt und dabei eine langsame Kompression stattfindet, wie sie Abbildung 4.17 zeigt. Im Fall der Schraubenversetzung mit der hohen steilen Energiebarriere setzt zuerst die Bewegung nur einer Partialversetzung ein, so daß sich je nach Vorzeichen der Spannung, wie beobachtet, Kompression bzw. Dilatation der Versetzung ergibt, bis die zusätzliche interne Spannung der Versetzung eine abwechselnde Bewegung der Partialversetzungen vorgibt. Dieser ungünstig vorgespannte Zustand ist offensichtlich verantwortlich für die hohen berechneten kritischen Spannungen im

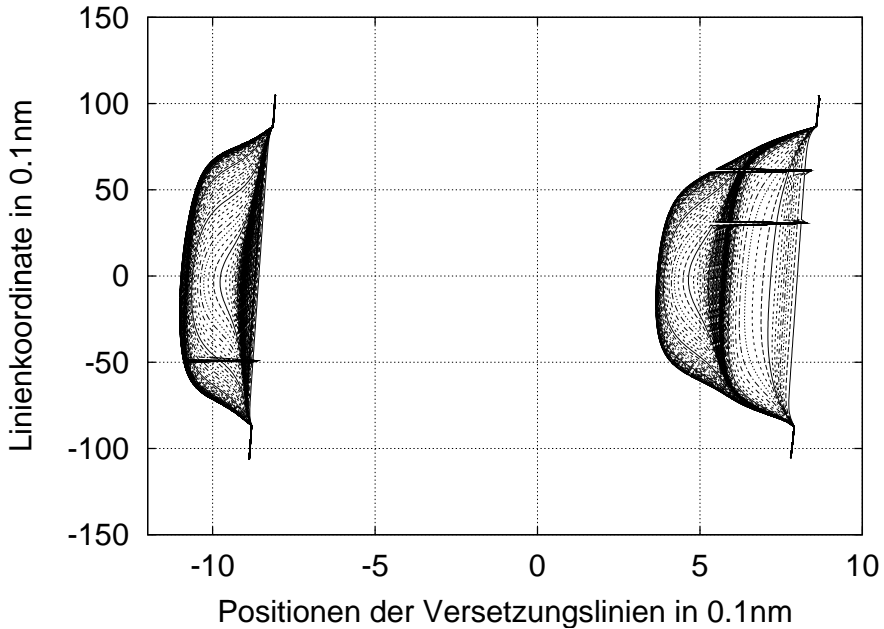


Abbildung 4.27: Zeitlich äquidistante Versetzungslinien einer aufgespalteten verankerten Schraubenversetzung unter 300 MPa [100]-Zug.

Gegensatz zu den niedrigen Spannungen der NEB Methode, die eine symmetrische Bewegung der Versetzungen simuliert.

Die Abnahme der kritischen Spannungen mit der Versetzungslänge und die ebenfalls zunehmende Ausbauchung der Versetzung in der Bewegung, dokumentiert auf Seite 64, deutet darauf hin, daß ein Kinkpaarbildungsmechanismus diese Blockade überwindet. Die einfachste modellunabhängige Extrapolation der gefundenen kritischen Spannungswerte für verschiedene simulierte Versetzungslängen ergibt eine freie Versetzungslänge von ca. 300 – 400 Burgersvektorstrecken als jene Länge, bei der der Kinkpaarbildungsmechanismus voll zum Tragen kommt. Eine Vorstellung davon, wie dieser aussehen wird vermittelt eine Simulation, bei der die Schraubenversetzung der Länge 214,7 Å an einem Punkt fixiert wird. Die in der quasistatischen Rechnung unter 300 MPa [100]-Zug entstehende Ausbauchung mit vorschreitender Iterationszahl zeigt Abbildung 4.27. Entstehung und Ausbreitung von Kinken in Richtung auf die fixierte Stelle sind zu sehen. An dieser Stelle sei angemerkt, daß in [140] bei Geschwindigkeitsmes-

sungen von Versetzungen keine reinen Schraubenversetzungen, sondern Stufenversetzungen und gemischte Versetzungen vom 30° Typ beobachtet wurden.

Die interessante Übereinstimmung der kritischen Spannungen der einzelnen Partialversetzungen mit denen, die aus der Lage des Bordoni Peaks abgeleitet wurden, legt nahe, daß es für die Auswertung des Bordoni Peaks wichtig ist, die bisher unberücksichtigte Aufspaltung der Versetzungen in die Modellbildung aufzunehmen.

Die auffällige Gleichheit der Energie für die unterschiedlichen Symmetriegenlagen der eingeschobenen Halbebene deutet darauf hin, daß für die einzelne Partialversetzung das einfache Peierls-Nabarro Modell mit der Symmetrie des kubischen Kristallgitters anwendbar ist, jedoch sind Minima und Maxima für die Energiebarriere der einzelnen Partialversetzung vertauscht.

Kapitel 5

Energiebarrieren der Versetzungsbewegung für Fremdatome in Kupfer

Neben den Energiebarrieren im reinen Kristall aus dem vorherigen Kapitel ist die benutzte Simulationsumgebung gut auf die Problemstellung der Wechselwirkung zwischen atomaren Hindernissen und Versetzungen anwendbar. Da durch das Einfügen verschiedener substitutioneller Fremdatome in beliebigen Konzentrationen eine große Menge an untersuchbaren Konfigurationen entsteht, wurde für das folgende Kapitel eine beschränkte Auswahl getroffen, um der Endlichkeit der Computerressourcen Rechnung zu tragen. Mit den in Kapitel 2.2.1 vorgestellten Potentialen lassen sich für Kupfer folgende Kombinationen berechnen: Cu-Ag, Cu-Au, Cu-Bi, Cu-Fe, Cu-Ti und Cu-Leerstelle. Mit den verschiedenen in den vorhergehenden Kapiteln vorgestellten Simulationsmethoden können folgende Aspekte des Themas untersucht werden:

- Nahfeldwechselwirkung zwischen Fremdatom und Versetzung durch energetische Betrachtungen von Relaxationsrechnungen,
- Energiebarriere durch das Fremdatom im Versetzungskern bei Passage einer Partialversetzung
- und quasistatische Versetzungsbewegung im Hindernisfeld mehrerer Fremdatome gleicher Sorte.

Die ausgewählten Simulationen stellen einige wenige Parameter bereit als mögliche Eingabeparameter für andere Modelle. Ziel dieses Kapitels ist es jedoch in

erster Linie, die Kapazitäten der Methoden zu zeigen. Aus diesen Gründen beschränkt sich das nächste Kapitel auf qualitative Betrachtungen. Es stellt einen Ausblick auf die möglichen Fragestellungen der Zukunft dar und liefert mit den Animationen der quasistatischen Versetzungsbewegung eine Vorstellung, zu welchen Simulationen zukünftige Rechnergenerationen fähig sein werden.

5.1 Energiebarrieren für verschiedene Atomsorten

5.1.1 Nahe Wechselwirkung zwischen Versetzung und Fremdatom

Für diesen Abschnitt wurden Kupferatome um eine Partialversetzung der aufgespaltenen Gesamtversetzung innerhalb eines kleinen Gebietes gezielt durch Fremdatome bzw. Leerstellen ersetzt. Die Versetzungen haben je eine Länge von ca. 71 Å.

In der elastizitätstheoretischen Betrachtung, in welcher das Atom als eingeschlossene Kugel angenommen wird, unterscheidet man den Beitrag zur elastischen Energie aufgrund der Fehlpassung, d.h. der unterschiedlichen Gitterparameter, und dem aufgrund der veränderten elastischen Moduln des Einschlusses im Spannungsfeld der Versetzung [1][142][143][144][145]. Der Größeneffekt ist proportional zur auftretenden Dehnung $\beta = 1 - \frac{a_0^{\text{Fremdatom}}}{a_0^{\text{Cu}}}$. Als obere Abschätzung für die Wechselwirkungsenergie ΔE dient der einfachste Fall, der das Fremdatom als harte Kugel im isotropen fcc Kristall annimmt. In zylindrischen Koordinaten um die Versetzung ergibt sich mit dem Schubmodul μ

$$\Delta E^{\text{Größe}} = \frac{3}{4\pi} a_0^3 \mu b \frac{\sin(\theta)}{r} \beta, \quad (5.1)$$

wobei b der jeweilige Stufenanteil des Burgersvektors der Partialversetzung ist. Den Moduleffekt beschreibt ein gebrochen rationales Polynom in den elastischen Konstanten :

$$\Delta E^{\text{Modul}} = \frac{\mu b^2}{8\pi^2 r^2} \frac{a_0^3}{4} \left[\frac{2}{15} \left(\frac{4-5\nu}{1-\nu} \right) + \frac{\mu}{\Delta\mu} \right]^{-1} \quad (5.2)$$

Ausgehend von den Werten der FS-Potentiale der Simulation ergeben sich die Abschätzungen zu

	Cu	Ag	Au	Bi	Fe	Ti
a_0 in Å	3,615	4,086	4,078	3,565	4,173	2,8665
β	1	0,130	0,128	-0,014	0,154	-0,207
$\Delta E^{\text{Größe}} \frac{r}{b \sin(\theta)}$ in eV	0,0	0,50	0,49	-0,05	0,59	-0,80
$\Delta E^{\text{Modul}} \frac{r^2}{b^2}$ in eV	0,0	-0,024	-0,028	-0,041	0,113	-0,164

Für die Schraubenpartialversetzung ist $b = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}a_0$, für die Stufenpartialversetzung $b = \frac{1}{2\sqrt{2}}a_0$. Die Abbildungen 5.1 und 5.2 zeigen sowohl den Größeneffekt als auch den Moduleffekt. Die Atome liegen je in Positionen, in denen die Wechselwirkung aufgrund des Größeneffektes mit der Partialversetzung attraktiv oder repulsiv ist.

Für die Stufenversetzung kann man die wechselnden Vorzeichen der Krümmung relativ zur Gleitebene gut beobachten (Abb. 5.1). Bismut zeigt ein abweichendes Verhalten, welches keinem der beiden Effekte direkt zugeordnet werden kann. Bei Titan ist der Moduleffekt in derselben Größenordnung wie beim Größeneffekt zu sehen durch die ebenfalls vom Fall des Größeneffektes abweichenden Krümmungen der Energieverläufe. Im Fall der Stufe ist also, wie aus der Werten der obigen Tabelle zu erwarten, der Größeneffekt bestimmend. Die fehlende Symmetrie der Wechselwirkungsverläufe kann durch die Anisotropie des Materials, als auch durch den Stapelfehler bedingt sein. Die Ähnlichkeit der Wechselwirkungsenergien für Silber, Gold und Eisen als Fremdatome mit ähnlichen Gitterkonstanten deuten auch darauf hin, daß der Moduleffekt keine wesentliche Rolle für die Stufenversetzung spielt.

Im Fall der Schraubenversetzung zeigen sich Abweichungen vom erwartet Verhalten des Größeneffektes. Bis auf Titan und Leerstelle als Zentren starker negativer Dehnung sind die Krümmungen durchweg positiv. Das bedeutet, daß der Moduleffekt hier einen höheren Energiebeitrag liefert, als der Größeneffekt. Führt man dieses Verhalten in der elastischen Interpretation auf den anderen Burgersvektoranteil b zurück, so sollten die numerischen Werte in der Tabelle auf Seite 72 maximal um den Faktor $\sqrt{3}$ unterschiedlich sein. Generell kann man jedoch aus den Abbildungen 5.1 und 5.2 abschätzen, daß die Bindungsenergien zwischen Versetzung und Fremdatom auf der Länge von 71 Å den Wert von 0.15eV nicht überschreiten. Ausnahmen sind das Titan und die Leerstelle mit 0.4 eV als Beispiele für einen starken negativen Größeneffekt und Moduleffekt mit gleichem Vorzeichens. Energetisch betrachtet sind die groben Abschätzungen des Größeneffektes der obigen Tabelle nahezu eine Größenordnung über den relaxierten atomistischen Werten. Zusammen mit dem vom Größeneffekt abweichenden Verhalten bei der Schraubenversetzung wird klar, daß das elastische Feld um die Fremdatome stark, sicherlich auch nichtlinear, relaxiert ist.

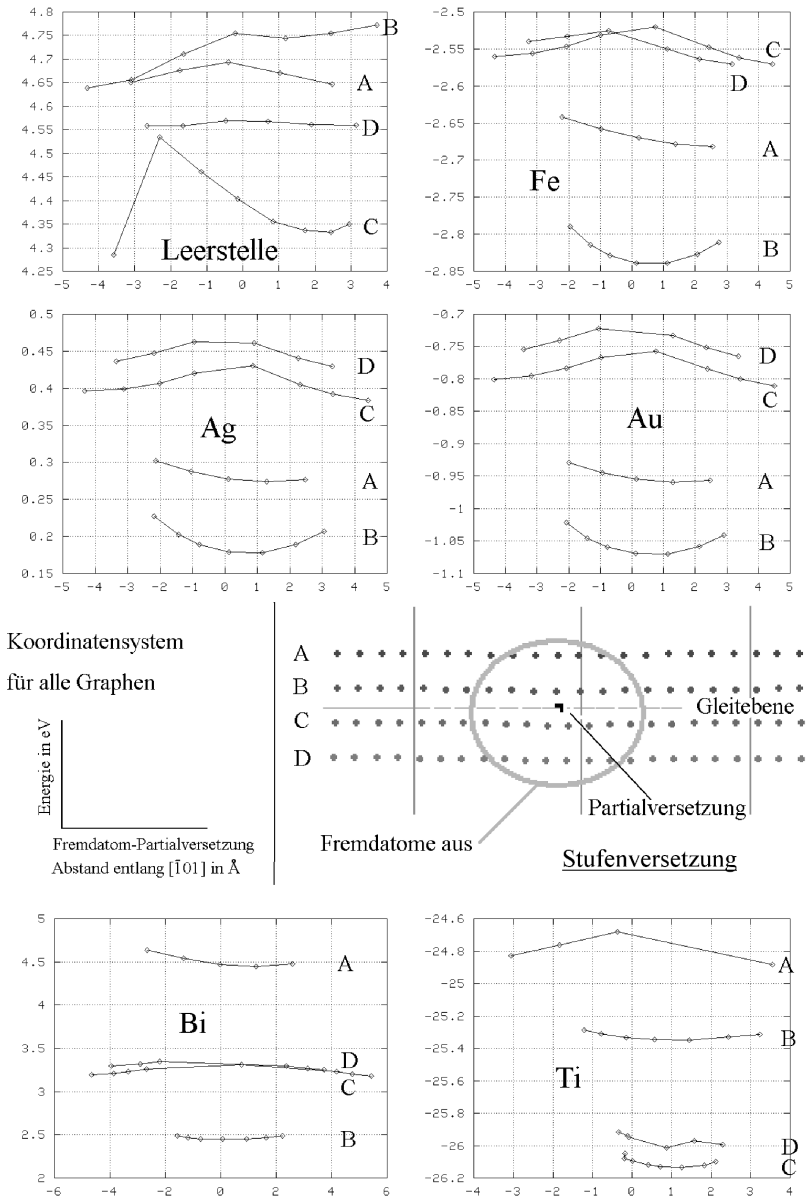
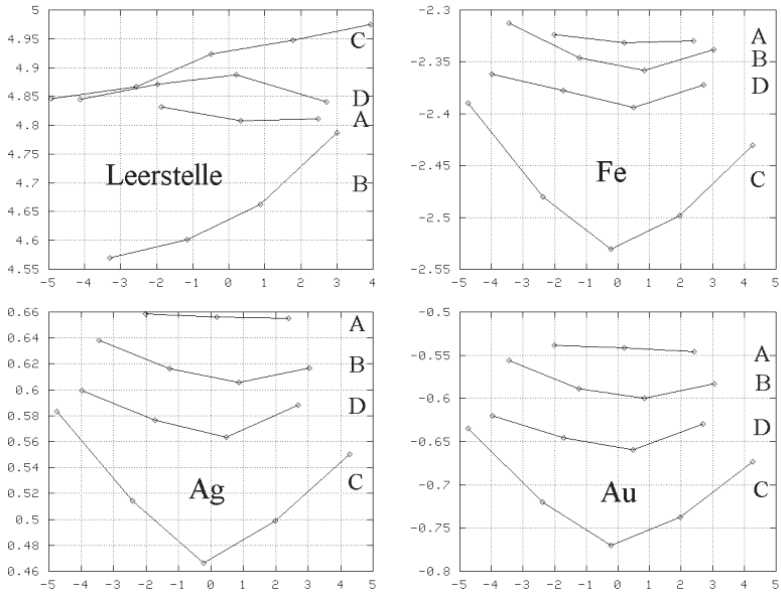


Abbildung 5.1: Nahpotential der Stufenversetzung für verschiedene Fremdatome.



Koordinatensystem

für alle Graphen

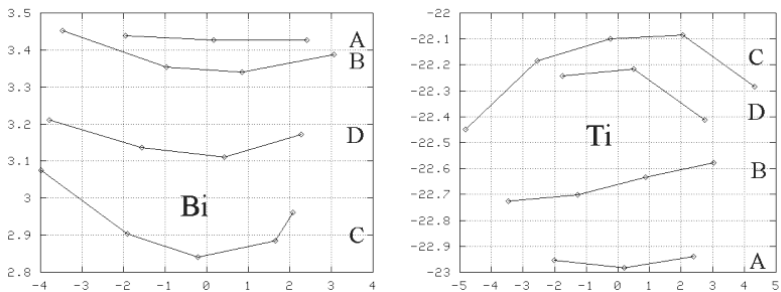
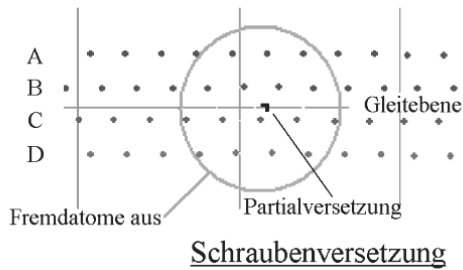
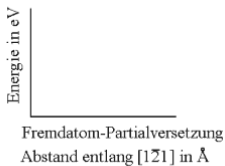


Abbildung 5.2: Nahpotential der Schraubenversetzung für verschiedene Fremd-
atome.

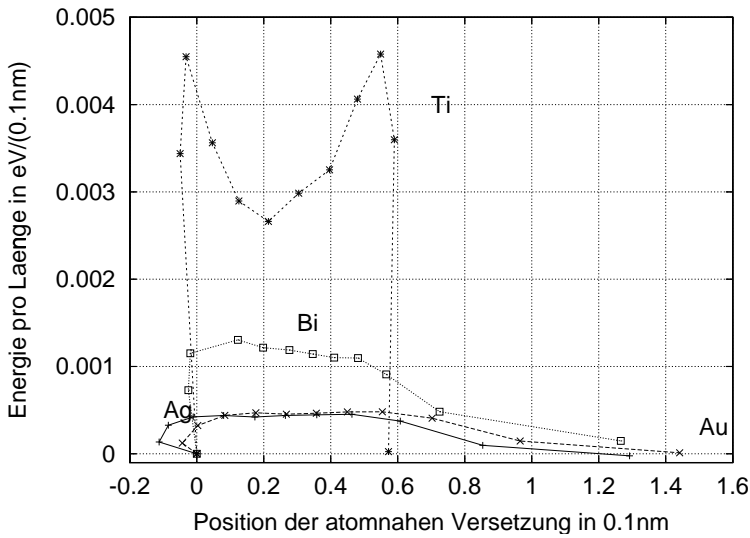


Abbildung 5.3: Energiebarrieren der Stufenversetzung für verschiedene Fremdatome.

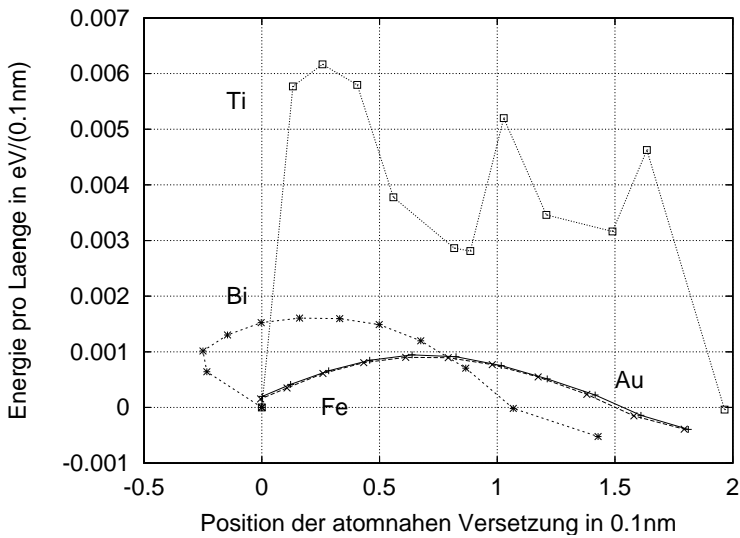


Abbildung 5.4: Energiebarrieren der Schraubenversetzung für verschiedene Fremdatome.

5.1.2 Fremdatom im Versetzungskern

Dieser Abschnitt zeigt die Ergebnisse der Rechnungen mit der NEB Methode. Zusammengefaßt sind diese in den Abbildungen 5.3 und 5.4. Die Fremdatome wurden jeweils am Ende der eingefügten Halbebene plaziert. Dann wurde mit den zwei stabilen Konfigurationen der Partialversetzung als Endpunkten der direkte Übergang modelliert. Es zeigt sich, daß Stufen- und Schraubenversetzungen nahezu gleiche Werte für die Energiebarrieren aufweisen. Bei der simulierten Versetzungslänge von 71 Å sind die Barrieren mit 0.1 – 0.4 eV je nach Atomsorte noch einmal in derselben Größenordnung, wie das Nahfeld. Ausgehend von der zusätzlichen stabilen Konfiguration für die Stufenversetzung bei $\frac{b_0}{2}$ zeigt sich dort ein lokales Minimum. Die unterschiedlichen, z.T. für die Schraubenversetzung unsinnig erscheinenden negativen Positionsangaben in Abbildung 5.4 sind darauf zurückzuführen, daß in der Positionsrechnung die lokal auftretenden Ausbauchungen der Partialversetzung in der Nähe des Fremdatoms mit der Versetzungslänge gemittelt werden. Dieser bei der Überwindung der Fremdatoms einsetzende Prozeß zeigt sich am Beispiel einer Schraubenversetzung mit einem Bismutatom in Abbildung 5.5. Die Ähnlichkeit der Barrieren für Gold, Silber und Eisen setzt sich fort. Im Fall von Titan erschwert die Stärke des Effektes eine numerische Betrachtung. Leerstellen können nicht betrachtet werden, da diese selbst den Algorithmus der Linienbestimmung stören und damit auswertbare Ergebnisse verhindern.

5.2 Quasistatische Versetzungsbewegung im Hindernisfeld

Simulationen der quasistatischen Bewegung wie im vorangegangenen Kapitel kann man auch für verdünnte Legierungen durchführen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde dies für Silber und Titan in Kupfer getan. Die Simulation der Cu-Ti Legierungen kann nur als Animation qualitativ ausgewertet werden, da starke an den Fremdatomen lokalisierte Schwingungen die energetische Betrachtung zu sehr stören. Im Fall der Legierung mit Silber stellt sich ein weiteres Problem ein. Für die Schraubenversetzung verdeckt die starke Variation der Energie aufgrund der Versetzungsbewegung nahezu die Wechselwirkung. Den Verlauf der in der Versetzung gespeicherten Energie zeigen Abbildungen 5.6 und 5.7. Es wird deutlich, daß die z.Z. möglichen Simulationen nicht mit der nötigen Länge durchgeführt werden können, um statistisch vertrauenswürdige Ergebnisse zu erhalten. Besonders deutlich sichtbar wird dies bei den Energieverläufen für 0,2% Ag und 0,1% Ag bei Durchgang der Stufenversetzung. Die erwartete Abfolge der Kurven wird durch die zufällige Anordnung der Atome umgekehrt. Die Abbildungen

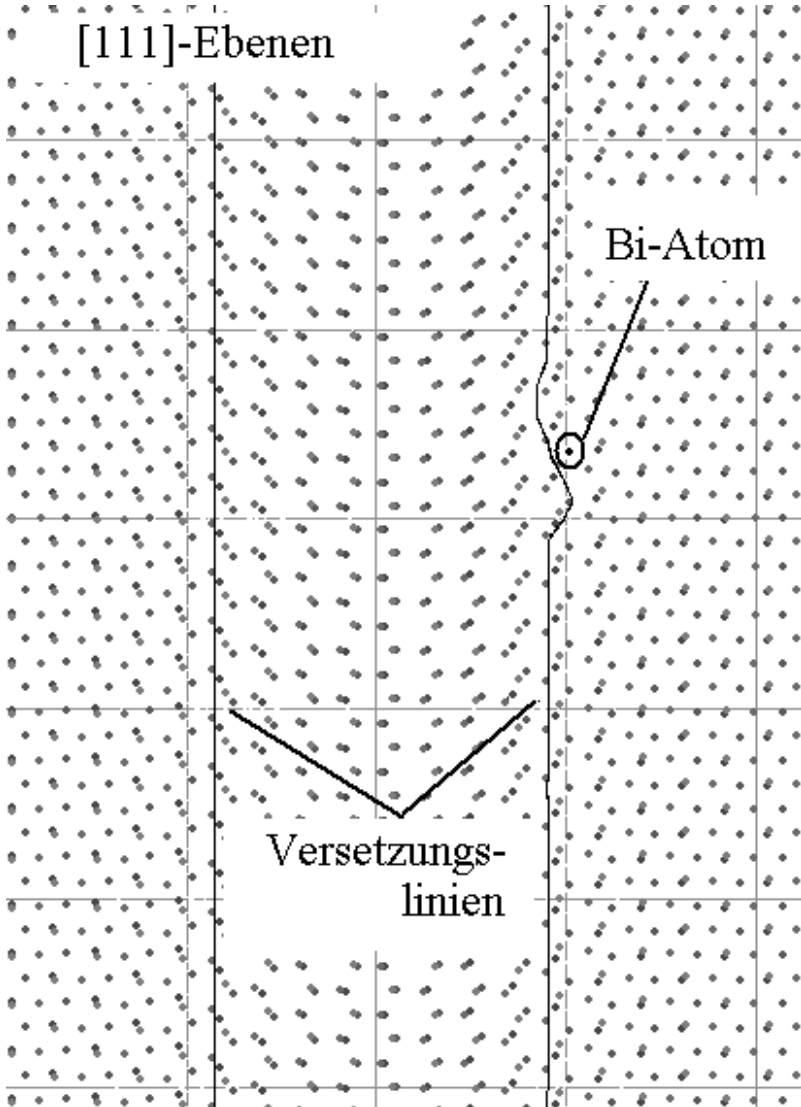


Abbildung 5.5: Linienkonfiguration in der $[111]$ -Ebene bei Überwindung eines Bi Atoms durch die rechte Schraubenpartialversetzung.

5.6 und 5.7 zeigen Bereiche positiver und negativer Steigung. In diesen Bereichen wird Energie in der Versetzungsconfiguration gespeichert bzw. freigesetzt. Nimmt man alle Energieverläufe mit negativer Steigung als maximalen Energieverlust an, so lassen sich für die Bewegungen Verlustkoeffizienten abschätzen. Diese sind für die Stufenversetzung ungefähr $3 \pm 1 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}^2}$ für die Konzentrationen 0.1% und 0.2% Silber und $6 \pm 1 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}^2}$ für die Konzentration 1.0% Silber. Für die Schraubenversetzung ist aus den vorliegenden Daten eine Abschätzung noch schwieriger, jedoch sollten die Werte denen der Stufenversetzung entsprechen. Beschränkt man eine Stufenversetzung periodisch auf die Länge von $17,7 \text{ \AA}$, so ist eine längere Simulation möglich. Aufgrund der unterdrückten Kinkpaarbildung ist dieses Vorgehen für die Schraubenversetzung nicht möglich. Die Ergebnisse zeigt Abbildung 5.8. Eine Auswertung dieser Atomverteilung liefert $2,5 \pm 0,5 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}^2}$. Mit ca. 125 \AA wurde dabei die mögliche freie Weglänge der Versetzung in der Simulationszelle fast ausgeschöpft. Man sieht, daß diese Art der Simulation sinnvolle Ergebnisse für eine gezielte Fragestellung liefern kann, insbesondere wenn man die hohe anfallende Rechenzeit nutzt, um in längeren Simulationsläufen mit größeren Zellen als den verwendeten $0,5 \cdot 10^6$ Atomen die statistischen Variationen der Legierungen auszugleichen.

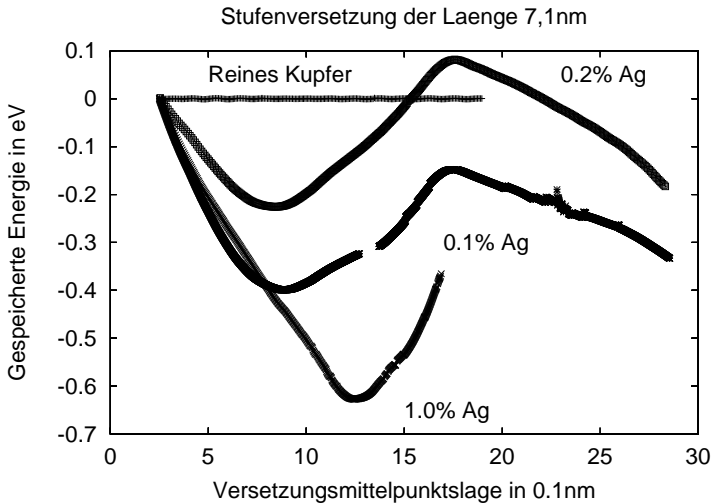


Abbildung 5.6: Gespeicherte Energie der Stufenversetzung bei quasistatischer Bewegung im Ag-Hindernisfeld.

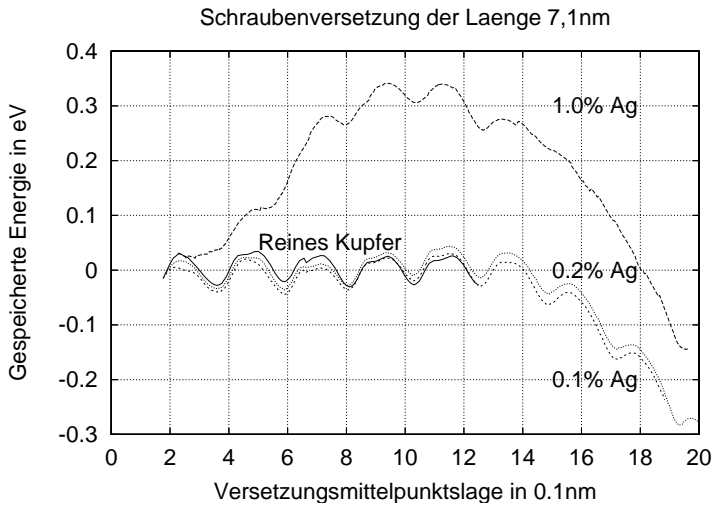


Abbildung 5.7: Gespeicherte Energie der Schraubenversetzung bei quasistatischer Bewegung im Ag-Hindernisfeld.

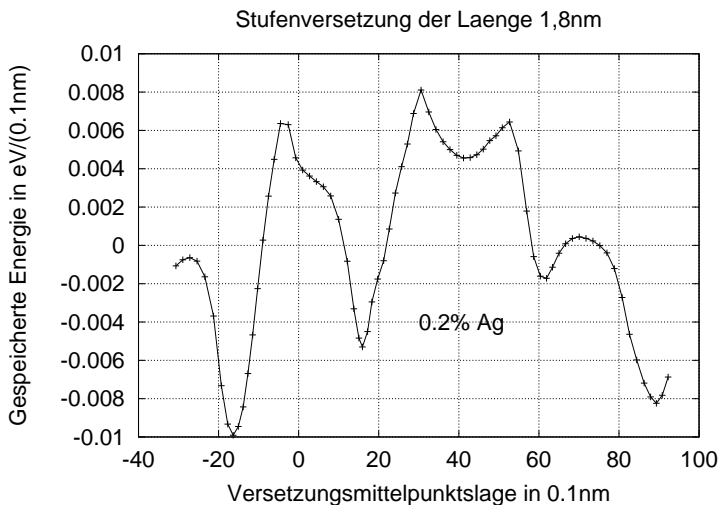


Abbildung 5.8: Gespeicherte Energie einer kurzen Stufenversetzung bei quasistatischer Bewegung im 0.2% Ag-Hindernisfeld.

Kapitel 6

Zusammenfassung

Zielsetzung der vorliegenden Arbeit war es, die Energiebarrieren der Versetzungsbewegung in Kupfer auf atomistischer Ebene mittels Simulation zu beschreiben und zu quantifizieren. Es hat sich gezeigt, daß die hier vorgestellte Kombination von Nudged-Elastic-Band Methode und dem neu formulierten Ansatz der quasistatischen Bewegungssimulation mit den in dieser Arbeit entwickelten flexiblen Randbedingungen diese Aufgabe gut erfüllt. Hierdurch wurde es möglich, mit der atomistischen Simulation die Peierlsenergie für die Versetzungsbewegung so zu beschreiben, daß auch quantitative Übereinstimmung mit den aus dem Experiment ableitbaren Werten erzielt wurde. Die Präsentation einiger Fallbeispiele zeigt, daß auch qualitative und quantitative Ergebnisse für die Wechselwirkung der aufgespaltenen Versetzung mit atomaren Hindernissen verfügbar werden.

6.1 Simulationsmethoden

Mit der Nudge-Elastic-Band Methode und der Methode der quasistatischen Bewegungssimulation stehen zwei Methoden zur Verfügung, die sich zur Bestimmung der Parameter von Energiebarrieren zwischen stabilen Lagen im Energie-Ortskoordinaten Raum eignen. Dieser Raum ist ein wichtiger Teilraum des Gesamttraumes aus Energiekoordinate und Phasenraum, da er die Grundzustände der Versetzungsconfiguration enthält. Die Anwendung der Methoden auf die atomistische Darstellung einer aufgespaltenen Versetzung in Kupfer zeigt das große Potential auf, welches sich aus der Kombination der Methoden und der heutzutage verfügbaren und in Zukunft weiter wachsenden Rechnerleistung ergibt. Die Kapitel 4 und 5 zeigen, daß sich die NEB Methode und die quasistatische Methode ergänzen. Die NEB Methode betrachtet den Minimal-Energie-Pfad, also den

Pfad der Überwindung des Sattelpunktes zwischen den stabilen Konfigurationen (Abb. 2.10) ohne externe Einflüsse, wie z.B. eine treibende externe Spannung der Versetzungsbewegung. Der betrachtete Pfad ist der prinzipiell günstigste, um die Endkonfigurationen zu verbinden. Dies gilt unabhängig von Einschränkungen der Bewegung durch äußere Einflüsse. Die Energiebarriere aus der NEB Rechnung ist also jene, die bei einer energetischen, d.h. thermischen, Aktivierung mindestens überwunden werden muß, um die Versetzungsbewegung zu ermöglichen. Dynamische Rechnungen thermischer Aktivierung sind mit dem gegenwärtigen Modell nicht ausführbar. Die statisch-flexiblen Randbedingungen stellen durch die von ihnen ausgehenden Reflexionen nicht kontrollierbare Fehlerquellen dar. Erforderlich wären dynamische Randbedingungen mit einem hohen Transmissionskoeffizienten. Diese transparente Einbettung in das Kontinuum muß auf den Gesetzen der Elastizitätstheorie beruhen. Neben den auf Seite 23 beschriebenen Ansätzen scheinen sich jene zur Untersuchung anzubieten, die ihre Grundlage in der Randelementmethode haben. Gute dynamische Randbedingungen würden ebenfalls den Übergang von der quasistatischen Rechnung zur rein dynamischen Rechnung ermöglichen.

Die Methode der quasistatischen Bewegungssimulation liefert Energiepfade im Energie-Ortskoordinaten Raum, die unter zusätzlichen treibenden Kräften ausgewählt werden. Besonders deutlich wird dies im Fall der Simulation der Schraubenversetzung unter externer Spannung. Die externe Spannung mit den unterschiedlichen Kräften auf die einzelnen Partialversetzungen gibt einen Pfad vor, der nicht dem der NEB Rechnung entspricht. Diese Beobachtung erklärt auch, warum bisherige Verfahren, die kritischen Spannungen durch Iteration stetig steigender externer Spannungen zu bestimmen, oft nicht erfolgreich waren. Für die Versetzung liefert die quasistatische Methode demnach den Prototyp für das Verhalten bei spannungsaktivierter Bewegung. Beide Bewegungsarten können sich, wie in Kapitel 4 gesehen, unterscheiden.

6.2 Simulationsergebnisse

Die Simulationen dieser Arbeit liefern qualitative sowie quantitative Ergebnisse.

Qualitative Ergebnisse

Qualitativ ergeben die vorliegenden Simulationsrechnungen, daß die Beweglichkeit der Versetzungen von der Art der Aktivierung abhängig sein kann. Energetische Aktivierung liefert einen anderen Bewegungsmechanismus als Aktivierung durch externe Spannungen.

Für die aufgespaltene Stufenversetzung oder Schraubenversetzung spielt in der energetischen Betrachtung ein Mechanismus eine Rolle, bei dem die abwechselnde Bewegung der Partialversetzungen günstiger ist, als die symmetrische Bewegung.

In der spannungsgetriebenen Bewegung unterscheiden sich Stufen- und Schraubenversetzung dadurch, daß die Stufenversetzung relativ leicht beweglich ist, die Schraubenversetzung hingegen zur Erreichung ähnlicher Beweglichkeiten auf angewiesen ist. Die zu erwartende Länge der Kinken ist jedoch sehr groß gegenüber dem Betrag des Burgersvektors.

In der Wechselwirkung mit Fremdatomen reagieren Stufen- und Schraubenversetzungen ähnlich. Effekte ähnlich dem Größen- und dem Moduleffekt der elastizitätstheoretischen Betrachtung können beobachtet werden. Die quasistatische Bewegung der aufgespaltenen Versetzung durch verschieden stark verdünnte Kupferlegierung mit Silber- bzw. Titanfremdatomen, dargestellt in den Animationen auf der beigelegten CDROM, zeigt, daß die Wechselwirkungsenergie sowohl in der Krümmung als auch in der Veränderung der Aufspaltungsweite der jeweiligen Versetzung gespeichert wird. Diese Simulationen zeigen außerdem, daß die Wechselwirkungen im atomaren Hindernisfeld sehr komplex sein können. Eine Parametrisierung kann nur für die einzelne Wechselwirkung oder als statistischer Mittelwert erfolgen.

Quantitative Ergebnisse

Die quantitativen Ergebnisse aus Kapitel 3 (Seite 30) für die zu erwartenden stabilen Aufspaltungsweiten der Versetzungen von ca. 4 nm für die Stufenversetzung, 3 nm für die 60°-Versetzung und 2 nm für die Schraubenversetzung sind in guter Übereinstimmung mit den verfügbaren Meßwerten [135][136].

Die Größe der sogenannten Peierlsenergie, jener minimalen Energiebarriere der Versetzungsbewegung im reinen Kristall, ergibt sich aus der Simulation für Kupfer als ca. $3 \cdot 10^{-6} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$ für die Stufenversetzung und $3 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$ für die Schraubenversetzung. Die zugehörigen kritischen Spannungen von ungefähr 1 bzw. 3 MPa sind in der erwarteten Größenordnung.

Die Wechselwirkungsenergien zwischen Versetzung und Fremdatomen sind mit ca. $2 - 5 \cdot 10^{-3} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$ um zwei bis drei Größenordnungen höher als die Peierlsenergie, jedoch deutlich unter den Werten der Elastizitätstheorie. Die erhaltenen Werte aus Kapitel 5 und die Simulation einiger zusätzlicher Werte können die Grundlage für die Formulierung eines Pseudopotentials des atomaren Hindernisfeldes für eine mesoskopische elastizitätstheoretische Simulation bilden.

Ausblick

Neben der Bereitstellung einiger beispielhafter quantitativer Ergebnisse bietet diese Arbeit ein komplettes Simulationspaket, das speziell zur Lösung der untersuchten Fragestellung entwickelt wurde und darüber hinaus viele Funktionen und Schnittstellen moderner Software aus dem Bereich Molekulardynamik enthält. Die zugrundeliegenden Methoden wurden in dieser Arbeit mit positivem Ergebnis geprüft. Die Simulationssoftware liegt in Form eines portierbaren, kommentierten C-Quellcodes auf der beiliegenden CDROM vor. Der Leser sei herzlich aufgefordert die Software für gezielte Fragestellungen, z.B. solche aus dem Problemfeld der mesoskopischen Versetzungsmodellierung, zu nutzen und nach seinen Anforderungen zu modifizieren. Die Auswahl einer Klasse von Simulationsexperimenten und die parametrische Beschreibung der gewonnenen Ergebnisse können u.a. als Eingabegrößen für Modelle auf größerer Skala dienen. Die Bestimmung mesoskopischer und makroskopischer Größen aus der statistischen Auswertung vieler Simulationsläufe oder großer Simulationsvolumina, wie sie ein Kapitel 5 beschrieben werden, ist eine Option, die sich mit der bereitgestellten Software und ausreichenden Rechnerkapazitäten verwirklichen läßt. Eine mögliche und erwünschte Erweiterung der Simulationssoftware durch dynamische Randbedingungen kann helfen, weitere Aspekte der Versetzungsbewegung und anderer Fragestellungen zum Thema Defektstrukturen im Festkörper auf atomarer Skala zu erschließen.

Anhang A

Anhang

A.1 Anisotrope linear elastische Versetzungslösung

An dieser Stelle soll kurz die Lösung der anisotropen linearen Elastizitätstheorie für eine unendlich lange gerade Versetzung mit Linienvektor \mathbf{l} und Burgersvektor \mathbf{b} im elastischen Kontinuum skizziert werden. Der folgende Lösungsansatz von A.N. Stroh beruht auf dem sextischen Formalismus. Für ausführliche Darstellungen siehe [1][17][146][18]. Die Grundgleichung der linearen Elastizitätstheorie [147] für das Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ ist unter Verwendung der Summationskonvention

$$\rho \ddot{u}_i(\mathbf{r}, t) = C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_j}{\partial r_k \partial r_l} \Big|_{(\mathbf{r}, t)} - f_i(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A.1})$$

mit Dichte ρ , elastischen Konstanten C_{ijkl} und Volumenkraftdichte $\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)$. Gleichung A.1 ergibt sich aus der Linearisierung der Lagrange-Verzerrung $\eta_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} - \frac{\partial u_i}{\partial r_k} \frac{\partial u_j}{\partial r_k} \right)$ zu $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right)$, dem Hookeschen Gesetz $\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$ für die Spannung σ als konjugierte thermodynamische Kraft zu ε und der Newtonschen Bewegungsgleichung für ein Volumenelement der Dichte ρ .

Im Folgenden wird nur der statische Fall des mechanischen Gleichgewichtes $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{r})$, d.h. $\ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t) = \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{0}$, betrachtet. Aufgrund der zweidimensionalen Struktur des Problems ist die Lösung nur von dem Koordinatensystem \mathbf{m}, \mathbf{n} senkrecht zur Versetzungslinie $\mathbf{m} \times \mathbf{n} = \mathbf{l}$ abhängig. Definiert man ein Tensorprodukt

$$\mathbf{d}(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{ij} = a_k C_{ikjl} b_l, \quad (\text{A.2})$$

so erhält man als partielle Lösung zu A.1

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{A} g(\mathbf{r} \cdot (\mathbf{m} + p\mathbf{n})) . \quad (\text{A.3})$$

p ist ein komplexer Eigenwert der 6×6 Matrix

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} -\mathfrak{d}(\mathbf{n}, \mathbf{n})^{-1} \mathfrak{d}(\mathbf{n}, \mathbf{m}) & -\mathfrak{d}(\mathbf{n}, \mathbf{n})^{-1} \\ -\left(\mathfrak{d}(\mathbf{m}, \mathbf{n}) \mathfrak{d}(\mathbf{n}, \mathbf{n})^{-1} \mathfrak{d}(\mathbf{n}, \mathbf{m}) - \mathfrak{d}(\mathbf{m}, \mathbf{m}) \right) & \mathfrak{d}(\mathbf{m}, \mathbf{n}) \mathfrak{d}(\mathbf{n}, \mathbf{n})^{-1} \end{pmatrix} . \quad (\text{A.4})$$

Der zum Eigenwert $p^{(\alpha)}$ gehörige 6-dimensionale Eigenvektor ist

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(\alpha)} \\ \mathbf{L}^{(\alpha)} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad L_i^{(\alpha)} = - \left(\mathfrak{d}(\mathbf{n}, \mathbf{m})_{ij} + p^{(\alpha)} \mathfrak{d}(\mathbf{n}, \mathbf{n})_{ij} \right) \mathbf{A}_j^{(\alpha)} \quad (\text{A.5})$$

mit der zusätzlichen Orthogonalitäts- und Normierungsbeziehung

$$\mathbf{A}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{L}^{(\beta)} + \mathbf{A}^{(\beta)} \mathbf{L}^{(\alpha)} = \delta_{\alpha\beta} . \quad (\text{A.6})$$

Da die Spannung und damit auch die ersten partiellen Ableitungen der Verschiebungen bis auf eine Polstelle auf der Versetzungslinie stetig sein müssen um die Bedingungen des mechanischen Gleichgewichts zu erfüllen, kann man die Funktion $g(\mathbf{r} \cdot (\mathbf{m} + p^{(\alpha)}\mathbf{n}))$ aus Gleichung A.3 durch einfache Integration mit der komplexen Variable $\xi_{(\alpha)} = \mathbf{r} \cdot (\mathbf{m} + p^{(\alpha)}\mathbf{n})$ aus einer Laurent-Reihe um den Ursprung ermitteln:

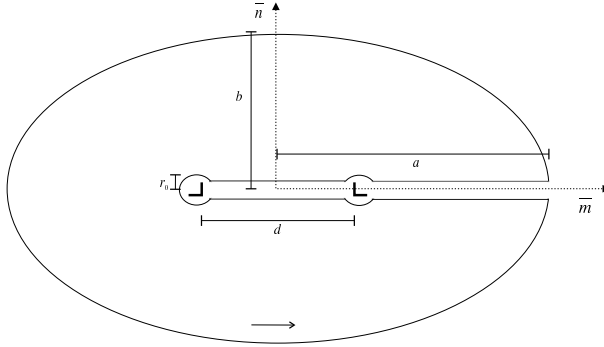
$$g(\xi_{(\alpha)}) = -\frac{D^{(\alpha)}}{2\pi i} \ln(\xi_{(\alpha)}) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \xi_{(\alpha)}^n . \quad (\text{A.7})$$

Führt man in einer beliebigen Ebene senkrecht zum Linienvektor der Versetzung ein geschlossenes komplexes Pfadintegral in ξ um den Ursprung über jeweils die Spannung σ und den Gradienten des Verschiebungsfeldes $\nabla \mathbf{u}$ aus und kombiniert dieses mit den eingeschlossenen Residuen und Bedingung A.6, so kann man die Koeffizienten $D^{(\alpha)}$ durch die beiden möglichen Quellen des Verschiebungsfeldes ausdrücken, durch einen Sprung im Verschiebungsfeld entlang einer Halbebene, welche die Versetzungslinie enthält, d.h. den Burgersvektor \mathbf{b} , und durch eine Linienkraft f . Das Ergebnis ist

$$D^{(\alpha)} = \pm (\mathbf{L}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{b} - \mathbf{A}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{f}) . \quad (\text{A.8})$$

Für den kräftefreien Fall einer aufgespaltenen Versetzung $\mathbf{b} \rightarrow \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$ mit Gleitebene $\mathbf{n} \cdot \mathbf{r} = 0$ lautet somit die einfachste Lösung

$$\mathbf{u}^{\text{JL}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{\alpha=1}^6 \pm \mathbf{A}^{(\alpha)} \cdot \left[(\mathbf{L}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{b}_1) \ln((\mathbf{r} - \mathbf{r}_1^0) \cdot (\mathbf{m} + p^{(\alpha)}\mathbf{n})) + (\mathbf{L}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{b}_2) \ln((\mathbf{r} - \mathbf{r}_2^0) \cdot (\mathbf{m} + p^{(\alpha)}\mathbf{n})) \right] . \quad (\text{A.9})$$

Abbildung A.1: Integrationspfad zu A.13 um die Fläche \mathcal{A} .

Wird die Versetzung am Ort festgehalten, z.B. durch Fremdatome, so ist auch eine Konfiguration unter externer Spannung σ^{extern} möglich. Da die lineare Auslenkung die Randbedingungen der Versetzungslösung erfüllt, ergibt sich die Gesamtlösung aus der Superposition der Einzellösungen

$$u_i(\mathbf{r}) = u_i^{\parallel}(\mathbf{r}) + r_j C_{ijkl}^{-1} \sigma_{kl}^{extern}. \quad (\text{A.10})$$

Ebenfalls von Interesse in dieser Arbeit ist die mechanische Energie pro Länge der Versetzung, welche in einem bestimmten Raumbereich mit Linienvektor der Versetzung als Symmetrieachse gespeichert ist, d.h.

$$\frac{E}{L} = \int_{\mathcal{A}} d\mathbf{S}(x, y) \left[\frac{1}{2} \frac{\partial u_i(\mathbf{r})}{\partial r_j} \bigg|_{\mathbf{r}=\mathbf{x}\mathbf{m}+\mathbf{y}\mathbf{n}} \underbrace{C_{ijkl} \frac{\partial u_k(\mathbf{r})}{\partial r_l} \bigg|_{\mathbf{r}=\mathbf{x}\mathbf{m}+\mathbf{y}\mathbf{n}}}_{\sigma_{ij}(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=\mathbf{x}\mathbf{m}+\mathbf{y}\mathbf{n}}} \right] \quad (\text{A.11})$$

mit Querschnittsfläche \mathcal{A} . Anwendung des Gaußschen Satzes der Integralrechnung und der mechanischen Gleichgewichtsbedingung $\frac{\sigma_{ij}(\mathbf{r})}{\partial r_j} = 0$ ergibt

$$\frac{E^{\parallel}}{L} = \oint_{\partial\mathcal{A}} d\mathbf{s}(\mathbf{r}) \sigma_{ij}^{\parallel}(\mathbf{r}) u_i^{\parallel}(\mathbf{r}) N_j(\mathbf{r}) \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned} &= \oint_{\partial\mathcal{A}} d\mathbf{s}(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{4\pi^2} \sum_{\alpha, \beta=1}^6 (\pm A_i^{(\alpha)}) (\pm A_j^{(\beta)}) (m_i + p^{(\alpha)} n_i) N_j \right. \\ &\quad \cdot [(\mathbf{L}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{b}_1) \ln((\mathbf{r}-\mathbf{r}_1^0) \cdot (\mathbf{m}+p^{(\alpha)} \mathbf{n})) + (\mathbf{L}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{b}_2) \ln((\mathbf{r}-\mathbf{r}_2^0) \cdot (\mathbf{m}+p^{(\alpha)} \mathbf{n}))] \\ &\quad \cdot \left. \left[\frac{\mathbf{L}^{(\beta)} \cdot \mathbf{b}_1}{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1^0) \cdot (\mathbf{m}+p^{(\alpha)} \mathbf{n})} + \frac{\mathbf{L}^{(\beta)} \cdot \mathbf{b}_2}{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2^0) \cdot (\mathbf{m}+p^{(\alpha)} \mathbf{n})} \right] \right). \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Das Linienintegral über den Rand der Fläche \mathcal{A} wird wie in Abbildung A.1 so ausgeführt, daß die Polstellen an den Positionen der Partialversetzungen durch Kreise mit Radius r_0 angenähert werden. Eine Lösung erfolgt in Kapitel 4.1 für den in Abbildung A.1 gezeigten Integrationspfad numerisch.

Literaturverzeichnis

- [1] J.P.Hirth,J.Lothe **THEORY OF DISLOCATIONS**, 2nd.Ed. Krieger Publishing Company, Malabar 1992
- [2] M.S.Daw,M.I.Baskes, Phys.Rev.Let., **50** (1983) 1285
- [3] M.S.Daw,M.I.Baskes, Phys.Rev. **B**, **29** (1984) 6443
- [4] M.W.Finnis,J.E.Sinclair, Phil.Mag **A**, **50** (1984) 45
- [5] R.M.Cotterill,M.Doyama, Phys.Rev. **135** (1966) 465
- [6] S.J.Zhou,D.L.Preston,P.S.Lomdahl,D.M.Beazley, Science, **279** (1998) 1525
- [7] H.v.Swygenhoven,A.Caro, Phys.Rev. **B**, **58** (1998) 11246
- [8] H.v.Swygenhoven,A.Caro, D.Farkas, Scripta mat., **44** (2001) 1513
- [9] S.Kohlhoff,P.Gumbsch,H.F.Fischmeister, Phil.Mag. **A** ,**64** (1991) 851
- [10] P.Heino,H.Häkkinen,K.Kaski, Phys.Rev. **B**, **58** (1998) 641
- [11] U.Pinsook, G.J.Ackland, Phys.Rev. **B**, **59** (1999) 13642
- [12] P.Heino,L.Perondi,K.Kaski,E.Ristolainen, Phys.Rev. **B**, **60** (1999) 14625
- [13] P.Gumbsch,H.Gao, Science **283** (1999) 965
- [14] J.von Boehm,R.M.Nieminen, Solid State Comm. **104** (1997) 63
- [15] T.Rasmussen,K.W.Jacobsen,T.Leffers,O.B.Pedersen , Phys.Rev.**B**, **56** (1997) 2977
- [16] J.M.Burgers, Proc.Phys,Soc **52** (1940) 23
- [17] D.J.Bacon,D.M.Barnett,R.O.Scattergood, Progress in Material Science **23** (1979) 51

- [18] T.C.T.Ting, **Anisotropic Elasticity** : Oxford Science Publications 1996
- [19] H.Pfleiderer,A.Seeger,E.Kröner, Z.Naturforschg. **15a** (1960) 758
- [20] A.Seeger,E.Mann, Z.Naturforschg. **14a** (1959) 154
- [21] R.A.Toupin,R.S.Rivlin, J.Math.Phys., **1** (1960) 8
- [22] R.Wang,K.L.Pan, Phys.stat.sol. **B,163** (1991) 75
- [23] V.K.Tewary, Phil.Mag **A,80** (2000) 1445
- [24] S.J.Zhou,A.E.Carlsson,R.Thomson, Phys.Rev. **B, 49** (1994) 6451
- [25] J.Frenkel,T.Kontorova, J.Phys. USSR **1** (1939) 137
- [26] U.Dehlinger,A.Kochendörfer, Z.f.Phys. **116** (1940) 576
- [27] J.Hobart, J.Appl.Phys., **36** (1965) 1944
- [28] J.Hobart, J.Appl.Phys., **36** (1965) 1948
- [29] G.Cortellazzi,S.Boffi,G.Caglioti,F.Rossitto, J.Appl.Phys., **44** (1973) 1518
- [30] A.I.Landau, Phys.stat.sol. (b), **191** (1995) 67
- [31] Y.H.Ohashi,K.Ohashi,M.Fukuchi, J.Phys.Soc.Jap., **59** (1990) 3260
- [32] K.Edagawa,T.Suzuki,S.Takeuchi, Phys.Rev. **B, 55** (1997) 6180
- [33] M.B.Fogel,S.E.Trullinger,A.R.Bishop,J.A.Krumhansl, Phys.Rev. **B, 15** (1971) 1578
- [34] M.B.Fogel,S.E.Trullinger,A.R.Bishop,J.A.Krumhansl, Phys.Rev.Let., **36** (1976) 1411
- [35] R.Boesch,C.R.Willis, Phys.Rev.**B, 39** (1989) 361
- [36] P.Woaf,T.C.Kofane Sol.State Comm., **89** (1994) 261
- [37] R.A.Vardanian,Y.A.Osip'yan, Sov.Phys.JETP, **67** (1988) 1682
- [38] E.A.Dorothyev,S.I.Matveenko, JETP Let., **58** (1993) 380
- [39] T.Munakata,A.Igarashi, Phys.Rev.**B, 46** (1992) 13786
- [40] B.Joós,M.S.Duesbery, Phys.Rev. **B, 55** (1997) 11161
- [41] R.A.Vardanian,T.V.Zakarian, Solid State Comm., **86** (1993) 455

- [42] F.Zhang,Y.S.Kivshar,L.Vasquez, Phys.Rev. **A,45** (1992) 6019
- [43] F.Zhang,Y.S.Kivshar,B.A.Malomed,L.Vasquez, Physics Let. **A,159** (1991) 318
- [44] R.Peierls, Proc.Phys.Soc **52** (1940) 34
- [45] F.R.N.Nabarro, Proc.Phys.Soc **59** (1947) 256
- [46] J.N.Wang, Mat.Sci.Eng. **A, 206** (1996) 259
- [47] B.Joós,M.S.Duesbery, Phys.Rev.Let., **78** (1997) 266
- [48] K.Ohsawa,H.Koizumi,H.O.K.Kirchner,T.Suzuki, Phil.Mag. **A ,69** (1994), 171
- [49] S.Nakahara, Mat.Sci.Eng. **A, 112** (1989) 43
- [50] F.R.N.Nabarro, Mat.Sci.Eng. **A, 234-236** (1997) 67
- [51] A.Seeger,G.Schoeck, Acta Met., **1** (1953) 519
- [52] G.Schoeck, Phil.Mag, **A, 69** (1994) 1085
- [53] G.Schoeck, Scripta Met. et Mat., **30** (1994) 611
- [54] G.Schoeck, Acta Mat., **43** (1995) 3679
- [55] G.Schoeck, Acta Mat., **45** (1997) 2597
- [56] G.Schoeck, Phys.Rev.Let., **82** (1999) 2311
- [57] G.Schoeck, Phil.Mag. **A, 79** (1999) 2629
- [58] G.Schoeck, J.of alloys a.compounds, **310** (2000) 2
- [59] H.Li,X.-D.Peng,N.-B.Ming J.of Crystal Groth, **149** (1995) 241
- [60] T.A.Arias,J.D.Joannopoulos, Phys.Rev.Let. ,**73** (1994) 680
- [61] S.Öberg,P.K.Sitch,R.Jones,M.I.Heggie, Phys.Rev.**B, 51** (1995) 13138
- [62] P.K.Sitch,R.Jones,S.Öberg,M.I.Heggie, Euro.Phys.J.Appl.Phys., **7** (1997) 1381
- [63] P.K.Sitch,R.Jones,S.Öberg,M.I.Heggie, Phys.Rev.Let.,**52** (1995) 4951
- [64] G.Csanyi,T.D.Engeness,S.Ismail-Beigi,T.A.Arias, J.of.Phys./Cond.Matter, **12** (2000) 10029

- [65] X.Blase,K.Lin,A.Canning,S.G.Louie,D.C.Chrzan, Phys.Rev.Let., **84** (2000) 5780
- [66] T.Shinoda,K.Masuda-Jindo,T.Suzuki,Phil.Mag. **B** ,**62** (1990) 289
- [67] J.Hartford,B.v.Sydow,G.Wahnstrøm,B.I.Lundqvist, Phys.Rev **B**, **58** (1998) 2487
- [68] S.Ismail-Beigi,T.A.Arias, Phys.Rev.Let., **84** (2000) 1499
- [69] M.P.Allen and D.J.Tildesley, **Computer simulation of liquids**, Clarendon Press, Oxford 1990
- [70] D.C.Rapaport, **The art of molecular dynamics simulation**, Cambridge Univ. Press, Cambridge 1998
- [71] W.G.Hoover, **Molecular dynamics**, (Lecture notes in physics ; Vol.258), Springer, Berlin 1986
- [72] P.Stoltze, **Simulation methods in atomic-scale material physics**, Polyteknisk Forlag, Lyngby, Dänemark 1997
- [73] R.Bullough, V.K.Tewary: **Lattice theories of dislocations in Dislocations in Solids 2**, ed. F.R.N.Nabarro, North-Holland, Amsterdam 1979
- [74] S.Ando,K.Takashima,H.Tondo, Mat.Trans. JIM **37** (1996) 319
- [75] M.J.Norgett,R.C.Perrin,E.J.Savino, J.Phys **F**, **2** (1972) L73
- [76] J.Huang,M.Meyer,V.Pontikis Phys.Rew. **B**, **42** (1990) 5495
- [77] A.Horsfield, Phil.Mag. **A**, **73** (1996) 85
- [78] J.Tersoff, Phys.Rev.Let., **56** (1986) 632
- [79] J.K.Norskov,N.D.Lang, Phys.Rev. **B**, **21** (1981) 2123
- [80] G.J.Ackland,G.Tichy,V.Vitek,M.W.Finnis, Phil.Mag. **A** ,**56** (1987) 735
- [81] G.J.Ackland,V.Vitek, Phys.Rew. **B** ,**41** (1990) 10324
- [82] G.J.Ackland, Phil.Mag. **A** ,**66** (1992) 917
- [83] G.J.Ackland,R.Thetford, Phil.Mag. **A** ,**56** (1987) 15
- [84] W.E.Wallace,G.J.Ackland, Surf.Sci.Let. **275** (1992) L685

- [85] M.Yan,M.Šob,D.E.Luzzi,V.Vitek,G.J.Ackland,M.Methfessel,C.O.-Rodriguez, Phys.Rev **B**, **47** (1993) 5571
- [86] G.J.Ackland,D.J.Bacon,A.F.Calder,T.Harry, Phil.Mag. **A**, **75** (1997) 713
- [87] D.T.Kulp,G.J.Ackland,M.Šob,V.Vitek,T.Egami, Modelling Simul.Mater. Sci.Eng. **1** (1993) 315
- [88] A.V.Granato,K.Lücke,J.Schlipf,L.J.Teutonico, J.Appl.Phys., **35** (1964) 2732
- [89] V.Vitek,R.C.Perrin,D.K.Bowen Phil.Mag, **21** (1970) 104
- [90] M.Grujicic, J.Mat.Sci. **32** (1997) 1749
- [91] R.Schroll,P.Gumbsch,V.Vitek, Mat.Sci.&Eng. **A**, **233** (1997) 116
- [92] D.Farkas,C.G.Schon,M.S.F.de Lima, H.Goldenstein, Acta mater. **44** (1996) 409
- [93] T.Rasmussen, **Atomic Scale Simulations of Dislocation Reactions:** Ph.D. Thesis Materials Research Department, Risø National Laboratoty, DK-4000 Roskilde, Denmark, January 1998
- [94] F.Reif, **Fundamentals of statistical and thermal physics**, McGraw-Hill Book Company, Singapore 1985
- [95] J.Schnakenberg, **Algorithmen in der Quantentheorie und Statistischen Physik**, Verlag Zimmer-Neufang, Ulmen, Germany 1995
- [96] S.Nosé, J.Chem.Phys. **76** (1982) 2662
- [97] W.G.Hoover, Phys.Rev. **A**, **31** (1985) 1695
- [98] H.C.Andersen, J.Chem.Phys. **72** (1980) 279
- [99] S.M.Kast,K.Nicklas,H.-J.Bär,J.Brickmann, J.Chem.Phys., **100** (1994) 566
- [100] S.M.Kast,J.Brickmann, J.Chem.Phys., **104** (1996) 3732
- [101] M.Parrinello,A.Rahman, J.Chem.Phys. **81** (1984)
- [102] S.R.Phillpot,Phys.Rev.**B**, **49** (1994) 7639
- [103] G.C.Lynch,B.M.Pettit, J.Chem.Phys. **107** (1997) 8594

- [104] H.Häkkinen,M.Manninen, Physica Scripta **T33** (1990) 210
- [105] J.R.Ray, Phys.Rev.**B**, **40** (1989) 423
- [106] J.R.Ray, Phys.Rev.**B**, **32** (1985) 113
- [107] R.J.Wolf,K.A.Mansour,M.W.Lee,J.R.Ray, Phys.Rev. **B**, **46** (1992) 8027
- [108] W.G.Hoover, Physica A **194** (1993) 450
- [109] D.J.Evans, Physica A **194** (1993) 494
- [110] K.Refsn, Physica **B**, **131** (1985) 256
- [111] G.Engeln-Muellges,F.Reutter, **Formelsammlung zur numerischen Mathematik mit C-Programmen**, Bibliograph. Inst., Mannheim 1987
- [112] W.H.Press,S.A.Teukolsky,W.T.Vetterling,B.P.Flannery, **Numerical recipes in C: the art of scientific computing** 2.ed., Cambridge Univ. Press, Cambridge 1999
- [113] P.Heino,E.Ristolainen, Nanostructured Mat., **11** (1999) 587
- [114] S.Brochard,P.Beauchamp,J.Grilhe, Phil.Mag. **A**, **80** (2000) 503
- [115] T.Rasmussen,K.W.Jacobsen,T.Leffers,O.B.Pedersen , S.G.Srinivasan,H.Jónsson, Phys.Rev.Let., **79** (1997) 3676
- [116] J.V.Lill,J.Q.Broughton, Phys.Rev.**B**, **49** (1994) 11619
- [117] J.V.Lill,J.Q.Broughton, Phys.Rev.**B**, **63** (2001) 144102
- [118] T.Rasmussen,T.Vegge,T.Leffers,O.B.Pedersen,K.W.Jacobsen, Phil.Mag. **A**, **80** (2000) 1273
- [119] J.von Boehm, R.M.Nieminen,Phys.Rev. **B** ,**53** (1996) 8956
- [120] J.von Boehm, R.M.Nieminen,Phys.Rev. **B** ,**50** (1994) 6450
- [121] J.von Boehm, R.M.Nieminen,Physica Scripta ,**T33** (1990) 216
- [122] R.Schroll, **Atomistische Modellierung der Versetzungsbeweglichkeit in NiAl**: Dissertation an der Universität Stuttgart, Bericht Nr.45 Juni 1997
- [123] A.Aslanides,V.Pontikis, Comp.Mat.Sci., **10**, (1998) 401
- [124] A.Aslanides,V.Pontikis, Phil.Mag **a** ,**80**, (2000) 2337

- [125] R.Mikulla,J.Stadler,F.Krul,H.-R.Trebin,P.Gumbsch, Phys.Rev.Let. **81** (1998) 3163
- [126] S.Rao,C.Hernandez,J.P.Simmons,T.A.Parthasarathy,C.Woodward, Phil.Mag. **A**, **77** (1998) 231
- [127] K.Ohsawa,E.Kuramoto, J.Appl.Phys., **86** (1999), 179
- [128] M.A.Sales,L.J.Gray, Computers & Structures, **69** (1998) 247
- [129] E.D.Tadmor,M.Ortiz,R.Phillips, Phil.Mag. **A**, **73** (1996), 1529
- [130] H.Jónsson,G.Mills,K.W.Jacobsen, **Classical and Quantum Dynamics in Condensed Phase Simulations** ed. B. J. Berne, G. Ciccotti and D. F. Coker:World Scientific 1998
- [131] G.Mills,H.Jónsson,G.K.Schenter Surface Sci., **342** (1995) 305
- [132] B.v.Sydow,J.Hartford,G.Wahnström, Comp.Mat.Sci., **15** (1999) 367
- [133] T.Vegge,J.P.Sethna,S.-A.Cheong,K.W.Jacobsen,C.R.Myers,D.C.Ralph, Phys.Rev.Let., **86** (2001) 1546
- [134] M.Wen,A.H.W.Ngan, Acta Mat., **48** (2000) 4255
- [135] W.M.Stobbs,C.H.Sworn, Phil.Mag., **24** (1971) 1365
- [136] B.Weiler,W.Sigle,A.Seeger, Phys.stat.sol.(a), **150** (1995) 221
- [137] D.J.H.Cockayne,M.L.Jenkins,I.L.Ray, Phil.Mag., **24** (1971) 1383
- [138] R.Berner,H.Kronmüller, Plastische Verformung von Einkristallen in **Moderne Probleme der Metallphysik** ed. A.Seeger, Springer, Berlin 1965
- [139] A.O.Moreno-Gobbi,J.A.Eiras, J.phys:cond.mat, **12** (2000) 859
- [140] H.Kurishita,S.Kitajima, **Dislocations in solids** ed. H.Suzuki et al., University of Tokyo Press, Tokyo 1985
- [141] K.M.Jassby,T.J.Vreeland, Phil. Mag., **21** (1970) 1147
- [142] I.Saxl, Czech.J.Phys. **B**, **14** (1964) 381
- [143] N.F.Fiore,C.L.Bauer, Progress in Materials Science,**13** (1968) 85

- [144] V.L.Indenboom,V.M.Chernow, **Thermally Activated Glide of a Dislocation in a Point Defect Field in Elastic Strain Fields and Dislocation Mobility**, ed.V.L.Indenboom,J.Lothe, Elsevier Science Publishers, Amsterdam 1992
- [145] P.Haasen, **Solution hardening in f.c.c metals in Dislocations in Solids 4**, ed. F.R.N.Nabarro, North-Holland, Amsterdam 1979
- [146] Toshio Mura, **Micromechanics of Defects in Solids** 2nd Ed.: (Mechanics of elastic and inelastic solids ; 3) Marinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, 1987
- [147] Josef Betten, **Elastizitäts- und Plastizitätslehre**: Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig/Wiesbaden, 1985